

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA**  
**CURSO DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA**

**SOLUÇÃO NUMÉRICA DE PROBLEMAS DE MUDANÇA  
DE FASE USANDO FORMULAÇÃO EM UM DOMÍNIO  
COM ACOMPANHAMENTO DA FRENTE**

*TESE DE DOUTORADO*

*AUTOR: RENATA SANTOS CRESPO*

*ORIENTADOR: CLOVIS R. MALISKA*


*FLORIANÓPOLIS, ABRIL DE 1996*

# **SOLUÇÃO NUMÉRICA DE PROBLEMAS DE MUDANÇA DE FASE USANDO FORMULAÇÃO EM UM DOMÍNIO COM ACOMPANHAMENTO DA FRENTE**

**RENATA SANTOS CRESPO**


**ESTA TESE FOI JULGADA ADEQUADA PARA A OBTENÇÃO DO TÍTULO DE  
DOUTOR EM ENGENHARIA**

**ESPECIALIDADE ENGENHARIA MECÂNICA, ÁREA DE CONCENTRAÇÃO  
DE ENGENHARIA E CIÊNCIAS TÉRMICAS, E APROVADA EM SUA FORMA  
FINAL PELO CURSO DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA.**




---

Prof. Clovis R. Maliska, Ph. D.  
Orientador



---

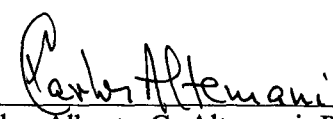
Prof. Antonio F. Carvalho da Silva, Dr. Eng.  
Coordenador do Curso



---

Prof. Clovis R. Maliska, Ph. D.  
Presidente

## **BANCA EXAMINADORA**



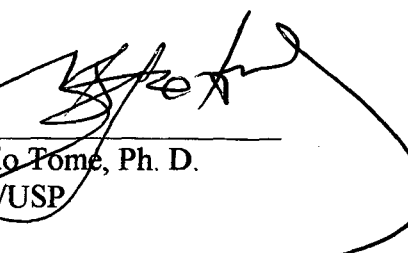
---

Prof. Carlos Alberto C. Altemani, Ph. D.  
UNICAMP



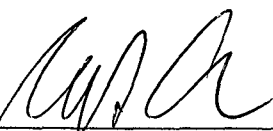
---

Prof. Marcelo Lemos, Ph. D.  
ITA/CTA



---

Prof. Murilo Tome, Ph. D.  
EESC/USP



---

Prof. Antonio F. Carvalho da Silva, Dr. Eng.  
UFSC

**Nenhum tempo é tempo  
bastante para a ciência  
de ver, rever.**

**Tempo, contratempo  
anulam-se, mas o sonho  
resta, de viver.**

*(Carlos Drumond de Andrade)*

**Aos meus filhos Diego e Cassiano,  
meus companheiros de vida.**

**Aos meus pais e irmãos,  
grandes amigos.**

## **AGRADECIMENTOS**

- Ao Maliska, amigo, pela sempre confiança.
- Aos professores do CPGEM / UFSC pelos ensinamentos transmitidos.
- Aos colegas e amigos do curso e do SINMEC pelo companheirismo e pelos momentos de alegria.
- À amiga Terezinha que cuidou dos meus filhos e de mim, amiga certa das horas incertas.
- Aos meus pais que sempre me deram todo o apoio.
- À Nação Brasileira que financiou todos os meus estudos. Agradeço e espero poder corresponder ao investimento feito em mim.

## RESUMO

O presente trabalho trata da simulação numérica de problemas envolvendo mudança de fase. Este é um tema ainda em desenvolvimento devido às dificuldades envolvidas no tratamento da frente de mudança de fase movendo-se no domínio. Existem dois tipos principais de solução; o método da temperatura, no qual a frente é determinada e o problema resolvido separadamente em dois domínios, com a aplicação de condições na interface, e o método da entalpia, no qual não se conhece a posição da frente e o problema é resolvido com formulação única para todo o domínio. No método da entalpia a existência da mudança de fase só é "noticiada" por meio do termo-fonte da equação da energia, surgindo, então, uma infinidade de métodos baseados na maneira de tratar este termo-fonte. O método proposto neste trabalho não se classifica nestes dois tipos clássicos. Possui uma nova concepção, baseada principalmente na idéia de dar um melhor tratamento numérico à frente de mudança de fase, porém, sem os inconvenientes da aplicação de uma condição de interface, como no método da temperatura. O novo método leva a excelentes soluções unidimensionais. É capaz de prever a posição da interface com erros médios da ordem de 0,5% com relação à solução exata. É também capaz de calcular corretamente a temperatura no domínio, ao contrário dos métodos de entalpia, que possuem dificuldade de fazê-lo. O método é generalizado utilizando-se de coordenadas curvilíneas não ortogonais e malhas móveis. São propostos dois tipos de malhas móveis, gerando duas metodologias diferentes, porém, com a mesma concepção. São resolvidos problemas unidimensionais com propriedades descontínuas e problemas bidimensionais sem e com convecção na fase líquida, com o objetivo de testar as metodologias, comparando-as com soluções existentes na literatura. Para a solução do problema convectivo, o método SIMPLEC com variáveis colocadas é empregado. O novo método é capaz de obter boas soluções em todos os casos testados. Este trabalho vem abrir um novo caminho para a simulação numérica de problemas de mudança de fase, estreitando os limites entre as duas linhas de pesquisa clássicas na área.

## **ABSTRACT**

*The present work deals with the numerical simulation of phase change problems. There are two basic methods available for solving this class of problems; the two domain method, where the temperature is solved for each domain with the application of the interface boundary condition, and the enthalpy method, which applies a single formulation for the whole domain. In the latter method the position of the moving front is not known exactly, and it is noticed through the source-term.*

*The method proposed in this work advances a new idea, where a better treatment is given to the moving front without the inconvenience of applying conditions at the interface. The method is able of predicting the position of the moving front with 0.5% error when compared with analytical solutions. It is also able to compute correctly the temperature in the domain, a feature which is not easily done by the enthalpy methods. The method is generalized using curvilinear coordinate systems and moving grids. Two moving grid methods are proposed. One and two-dimensional problems with discontinuous properties are solved and compared with the available results in the literature. It is also solved two-dimensional problems with convection heat transfer in the liquid using a colocated method with the SIMPLEC algorithm. The advanced method is a new view of solving phase change problems which narrows the limits between the two classical methodologies.*

## ÍNDICE

### CAPÍTULO 1 - INTRODUÇÃO

<b>1.1- CONSIDERAÇÕES INICIAIS</b>	<b>1</b>
1.1.1- Aplicações	1
1.1.2- Histórico	1
<b>1.2- REVISÃO BIBLIOGRÁFICA</b>	<b>3</b>
1.2.1- Modelos Físico/Matemáticos	3
1.2.2- Modelos Numéricos	8
<b>1.3 - OBJETIVOS DO TRABALHO</b>	<b>9</b>

### CAPÍTULO 2 - FORMULAÇÕES EM TEMPERATURA E EM ENTALPIA

<b>2.1- CONSIDERAÇÕES GERAIS</b>	<b>12</b>
<b>2.2- A CONSERVAÇÃO DE ENERGIA EM PROBLEMAS COM MDF</b>	<b>14</b>
2.2.1- Formulação em Entalpia Total	15
2.2.2- Formulação em Entalpia Sensível	16
2.2.3- Formulação em Temperatura	19
<b>2.3- CONSERVAÇÃO DA MASSA E DA QUANTIDADE DE MOVIMENTO</b>	<b>20</b>
2.3.1- Conservação da Massa	20
2.3.2- Conservação da Quantidade de Movimento	21
<b>2.4- CONTROLE DA VELOCIDADE NO MÉTODO DA ENTALPIA</b>	<b>22</b>
2.4.1- Método do "Desligamento"	22
2.4.2- Método da Viscosidade Variável	22
2.4.3- Método da Lei de Darcy	23
2.4.4- Comparação dos Três Métodos	25



## **CAPÍTULO 3 -ANÁLISE DOS PRINCIPAIS MÉTODOS**

<b>3.1- CONSIDERAÇÕES GERAIS</b>	<b>27</b>
<b>3.2- O MÉTODO DA TEMPERATURA</b>	<b>28</b>
3.2.1- Métodos de Acompanhamento da Fronteira	28
3.2.2- Métodos para Geração/Adaptação da Malha	30
<b>3.3- O MÉTODO DA ENTALPIA</b>	<b>34</b>
3.3.1- Método de Tacke	34
3.3.2- Métodos Baseados no Termo Fonte	36
3.3.3- Método com Posicionamento da Frente de Mudança de Fase	38
<b>3.4- COMPARAÇÃO ENTRE MÉTODOS DA       TEMPERATURA E DA ENTALPIA</b>	<b>40</b>

## **CAPÍTULO 4 - A IDÉIA BÁSICA DA NOVA PROPOSTA**

<b>4.1 - O EFEITO DA DISCRETIZAÇÃO</b>	<b>44</b>
4.1.1- A Solução de Neumann	44
4.1.2- Discretização da Equação	47
4.1.3- Linearização do Problema	53
4.1.4- Comparação das Soluções Numéricas e Analítica	54
<b>4.2 - O EFEITO DA INTERFACE MUDANDO DE VOLUME</b>	<b>56</b>
4.2.1- Correção do Fluxo de Calor	57
4.2.2- Comparação das Soluções Numéricas e Analítica	61
<b>4.3 - O NOVO MÉTODO</b>	<b>63</b>
4.3.1- Novo Tratamento da Frente de Mudança de Fase	63
4.3.2- O Balanço no Volume em Mudança de fase	63
4.3.3- Primeira Avaliação da Fração de Líquido	67
4.3.4- Comparação das Soluções Numéricas e Analítica	68
4.3.5- Conclusões	74

## **CAPÍTULO 5 - GENERALIZAÇÃO DO MÉTODO**

<b>5.1 - REQUISITOS BÁSICOS</b>	<b>76</b>
<b>5.2 - COORDENADAS GENERALIZADAS</b>	<b>78</b>
5.2.1- Introdução	78
5.2.2- Transformação Geral de Coordenadas Dependentes do Tempo	79
5.2.3- As Equações Transformadas	81
<b>5.3 - MALHA MÓVEL</b>	<b>84</b>
5.3.1- Conservação da Massa com Malha Móvel	84
5.3.2- Tipos de Malha Móvel Usados	87
5.3.3- Cálculo da Malha	92
<b>5.4 - DETALHES DO NOVO MÉTODO</b>	<b>97</b>
5.4.1- A Discretização dos Termos	97
5.4.2- Análise do Balanço de Energia nos Volumes em MDF	98
5.4.3- A Condição de Aderência na Interface	109
5.4.4- Fluxos de Quantidade de Movimento Junto à Interface	113

## **CAPÍTULO 6 - DISCRETIZAÇÃO EM VOLUMES FINITOS**

<b>6.1- LOCALIZAÇÃO DAS VARIÁVEIS NA MALHA</b>	<b>116</b>
<b>6.2- DISCRETIZAÇÃO DAS EQUAÇÕES</b>	<b>117</b>
<b>6.3- ACOPLAMENTO PRESSÃO-VELOCIDADE</b>	<b>123</b>
6.3.1- Avaliação das Velocidades nas Faces	123
6.3.2- Correção das Velocidades	126
6.3.3- Obtenção da Equação para a Pressão	127
<b>6.4- ALGORITMO GERAL</b>	<b>129</b>

## **CAPÍTULO 7 - RESULTADOS**

<b>7.1- CONSIDERAÇÕES GERAIS</b>	<b>134</b>
<b>7.2- SOLUÇÃO 1-D COM PROPRIEDADES DESCONTÍNUAS</b>	<b>134</b>
<b>7.3- SOLUÇÃO 2-D COM MALHA FIXA</b>	<b>140</b>
<b>7.4- SOLUÇÃO 2-D COM MALHA MÓVEL</b>	<b>146</b>
7.4.1 - Solução com Malha Ajustável	<b>146</b>
7.4.2 - Solução com Malha Coincidente com a Interface	<b>151</b>
<b>7.5- SOLUÇÃO 2-D COM CONVECÇÃO NO DOMÍNIO LÍQUIDO</b>	<b>153</b>

<b><u>CAPÍTULO 8 - CONCLUSÕES</u></b>	<b>161</b>
---------------------------------------	------------

<b><u>REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS</u></b>	<b>163</b>
--	------------

## **SIMBOLOGIA**

<b>a</b>	coeficiente na equação geral da pressão
<b>A</b>	coeficiente na equação geral de transporte ou área
<b>b</b>	termo fonte da equação da pressão
<b>B</b>	termo fonte modificado da equação geral de transporte
<b>c<sub>p</sub></b>	calor específico
<b>C</b>	coeficiente de difusão
<b>d</b>	coeficiente do termo de convecção no método SIMPLEC Eq.(6.31)
<b>D</b>	coeficiente relativo no fluxo difusivo, na eq. geral de transporte
<b>E</b>	entalpia total
<b>f</b>	fração volumétrica (concentração)
<b>F</b>	fluxo
<b>FD</b>	fator de desalinhamento da malha móvel
<b>Fo</b>	número de Fourier [ $\alpha t/L^2$ ]
<b>g</b>	aceleração da gravidade ou fração em volume
<b>h</b>	entalpia sensível
<b>H</b>	entalpia latente
<b>I</b>	inverso do jacobiano da transformação de coordenadas
<b><math>\vec{i}</math></b>	vetor de base unitário na direção x
<b><math>\vec{j}</math></b>	vetor de base unitário na direção y

J	jacobiano da transformação de coordenadas
k	condutividade térmica
L	dimensão característica
M	fluxo de massa
n	nível iterativo
$\vec{n}$	vetor unitário normal a superfície
P	pressão
Pe	número de Peclet [ $\rho u L / T$ ]
Pr	número de Prandtl [ $\mu c_p / k$ ]
r	número de Peclet da malha Eq.(6.5)
Ra	número de Rayleigh [ $g \beta \Delta T L^3 Pr / \nu^2$ ]
S	termo fonte na equação geral de transporte
ST	termo fonte modificado na equação geral de transporte
Ste	número de Stefan [ $c_p \Delta T / \lambda$ ]
t	tempo
T	temperatura
u	velocidade cartesiana da direção x
v	velocidade cartesiana da direção y
U,V	componentes contravariantes sem normalização métrica na velocidade
$\vec{V}$	vetor velocidade
$\tilde{U}, \tilde{V}$	componentes da velocidade relativa transformada
x,y	direções do sistema cartesiano de coordenadas

## LETRAS GREGAS

$\alpha$	difusividade térmica [k/ρc <sub>p</sub> ] ou componente do tensor métrico
$\tilde{\alpha}$	parâmetro do WUDS Eq.(6.4)
$\beta$	coeficiente de expansão volumétrica ou componente do tensor métrico
$\tilde{\beta}$	parâmetro do WUDS Eq.(6.4)
$\Delta$	diferença finita
$\gamma$	componente do tensor métrico
$\Gamma$	coeficiente de difusão na equação geral de transporte
$\eta$	coordenada do sistema transformado
$\lambda$	calor latente de fusão
$\Lambda$	porosidade
$\mu$	viscosidade absoluta
$\nu$	viscosidade cinemática
$\varphi$	ângulo
$\rho$	massa específica
$\tau$	tempo no sistema transformado
$\Omega$	constante do problema de Neumann
$\xi$	coordenada do sistema transformado

# **CAPÍTULO 1**

## **INTRODUÇÃO**

### **1.1- CONSIDERAÇÕES INICIAIS**

Os fenômenos de transferência de calor e massa associados a sistemas de mudança de fase sólido/líquido têm atraído a atenção de muitos pesquisadores recentemente, devido à sua importância prática. A seguir, apresentam-se algumas aplicações importantes e um breve apanhado histórico do desenvolvimento desta área.

#### **1.1.1- Aplicações**

Devido à sua grande importância em processos industriais e científicos, problemas envolvendo mudança de fase vêm sendo intensivamente estudados nas últimas décadas. Várias aplicações práticas estão associadas a mudanças de fase sólido/líquido (ou vice versa), dentre elas podem-se citar:

- Processos metalúrgicos, tais como lingotamento, fundição, soldagem, purificação de metais, etc.
- Instalações de armazenamento de energia térmica por meio de *material de mudança de fase - MMF* (“PCM- *phase change material*”).
- Controle térmico de aeronaves, tanto na utilização de material de mudança de fase, quanto para estudo da partida de tubos de calor inicialmente “congelados”.
- Crescimento de cristais.
- Processos de congelamento de produtos alimentares .

#### **1.1.2- Histórico**

Uma das primeiras publicações na área foi feita por Stefan. [1] aplicada ao estudo da espessura de gelo no mar polar. Por isso, o problema de

solidificação, abordado de forma semelhante à utilizada por Stefan em seu artigo, é comumente conhecido como "problema de Stefan". Este consiste na solução do deslocamento da frente de solidificação em um domínio líquido isotérmico à temperatura de fusão, a partir de um contorno subitamente mantido a uma temperatura inferior à de solidificação. A solução deste problema envolve apenas condução de calor no sólido e um balanço de energia na frente de solidificação que representa o equilíbrio entre o fluxo de calor na frente e o calor latente de solidificação do material incorporado em cada intervalo de tempo. Ou seja, o calor retirado na frente de solidificação determina a velocidade de deslocamento desta e a nova dimensão do domínio sólido em cada intervalo de tempo. Outra solução analítica clássica é devida a Neumann, datando dos anos 1860 [2]. A solução de Neumann é aplicada a problemas unidimensionais de fusão de um sólido subresfriado (a uma temperatura abaixo da de fusão) ou de solidificação de um líquido superaquecido (a uma temperatura superior à de solidificação), em um domínio semi-infinito. Neste caso estuda-se a condução do calor nos dois domínios, líquido e sólido, com a condição assintótica de temperatura igual à inicial para posições distantes da frente.

Até os dias de hoje, a maior parte das soluções analíticas tratou os problemas de mudança de fase em domínios unidimensionais ou semi-infinitos, levando em conta apenas a condução do calor [2-9]. Alguns poucos trabalhos abordaram casos bidimensionais em geometrias simples e condições muito específicas [10-14], sendo, por isso, de pouca aplicabilidade.

Resultados experimentais [16-21] mostraram a grande importância da convecção natural em problemas de mudança de fase. A convecção natural desenvolvida no líquido devido a gradientes térmicos influencia fortemente o perfil da frente de solidificação e sua velocidade de deslocamento. Quando a convecção natural é levada em consideração na solução do problema de mudança de fase, chegam-se a formas diferentes para a frente de solidificação e a de fusão, enquanto ambas são iguais no caso de condução pura. Em [15] é apresentada uma solução analítica por método integral de solidificação a partir de uma parede vertical, com convecção na fase líquida, apresentando bons resultados quando comparada a resultados experimentais.

Sendo o problema de mudança de fase bastante complexo por possuir uma fronteira móvel cuja posição depende da própria solução e por envolver dois domínios, existindo forte convecção natural no líquido, tornou-se evidente a necessidade de estudá-lo através de métodos numéricos potentes que permitissem soluções mais completas do problema, praticamente impossíveis de se obter através de métodos analíticos.

Basicamente duas maneiras de formular o problema de mudança de fase são utilizadas;

- o **método clássico**, que utiliza a temperatura como variável dependente;
- o **método da entalpia**, no qual a equação da energia é resolvida em termos da entalpia.



No **método clássico** os domínios sólidos e líquido são formulados de maneira independente e as soluções acopladas através de balanços na interface. Evidentemente, neste caso, a posição da interface deve ser conhecida no decorrer da solução. Por isso, numa solução numérica, torna-se imperativo o uso de malha móvel para acompanhar o movimento da frente de mudança de fase.

Quando se utiliza o **método da entalpia**, remove-se a necessidade de satisfazer a condições específicas na frente de mudança de fase. Uma mesma formulação é aplicada a todo o domínio e o calor latente de mudança de fase é levado em conta através de um termo-fonte na equação da energia, dado em função da entalpia latente avaliada em cada ponto. Por esta razão, o método da entalpia se aplica a soluções numéricas com malha fixa, por prescindir do acompanhamento da frente de mudança de fase durante a solução do problema.

Um excelente apanhado da teoria envolvida em problemas de “fronteira móvel”, da qual fazem parte os problemas de mudança de fase, encontra-se em Crank, [22].

Na próxima seção, apresentam-se considerações teóricas, baseadas na revisão bibliográfica, onde são tratados os diferentes modelos físico/matemáticos e modelos numéricos utilizados nos trabalhos da área. Deseja-se mostrar o panorama dos desenvolvimentos realizados na área, a fim de evidenciar a importância dos objetivos do presente trabalho, que serão apresentados logo após.

## 1.2- REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Uma revisão bibliográfica bastante completa sobre fusão/solidificação foi publicada em 1989 por Yao & Prusa [23].

Nesta seção, é feito um rápido resumo da teoria básica envolvida nos problemas de mudança de fase, a partir de uma revisão bibliográfica em trabalhos da área. Considerações são feitas com relação aos modelos físico/matemáticos e aos modelos numéricos empregados na solução de problemas de mudança de fase, com o principal objetivo de estabelecer o grau de dificuldade do problema e o estado da arte no assunto. Além disto, à medida que os diversos assuntos forem sendo tratados, indica-se ao leitor o capítulo ou seção onde são apresentados em detalhes.

### 1.2.1- Modelos Físico/Matemáticos

Os modelos empregados na solução de problemas de mudança de fase se diferenciam sob alguns aspectos, que serão tratados a seguir. Para fins de

organização das idéias estes modelos serão diferenciados quanto à composição do material envolvido na mudança de fase e quanto à formulação.

### Quanto à Composição do Material

A composição do material é uma característica muito importante para o comportamento físico do processo de mudança de fase. O material pode ser puro ou multi-componente.

Materiais puros ou misturas eutéticas mudam de fase a uma temperatura única, de forma abrupta. Existe, então, uma e apenas uma temperatura de fusão/solidificação para cada material puro na qual ele muda de fase (obviamente, para uma dada pressão). Neste caso dá-se a formação de uma frente de mudança de fase na qual a fusão ou a solidificação ocorre. Exemplos de materiais que se comportam desta forma: água, metais puros, parafinas (materiais de mudança de fase - MMF, em geral), etc.

Materiais multi-componentes tais como misturas, soluções e ligas mudam de fase dentro de uma faixa de temperatura, ou seja, a temperatura de fusão do sólido é diferente da de solidificação do líquido, e a temperatura de mudança de fase é função da concentração da mistura. Dá-se, então, o aparecimento de uma região intermediária conhecida como região "mole" ou "pastosa". Esta região é formada por uma matriz sólida cristalina permeável e saturada de líquido, cuja estrutura é microscópica, com dimensões da ordem de 10 a 100  $\mu\text{m}$ . [66]

A natureza específica da formação sólida na região intermediária é extremamente complexa, apresentando direções preferenciais de crescimento e morfologia variável, dependendo de temperatura e composições locais, dos gradientes e de características do próprio fluido. Como a liberação ou absorção de calor latente ocorre a nível destas interfaces microscópicas que separam as fases, a solução macroscópica de problemas com região intermediária depende da morfologia da estrutura cristalina formada nesta região.

Problemas de mudança de fase em materiais multi-componentes envolvem tanto fenômenos de difusão térmica quanto de difusão de massa, que provocam macro e micro segregação respectivamente, causando grande variação na concentração de soluto dentro das regiões líquida e intermediária, e por consequência, influenciando nas propriedades do sólido resultante de um processo de solidificação. Para descrever completamente o processo são necessárias, portanto, equações de transporte de massa, quantidade de movimento, energia e espécies, levando em consideração a existência das duas fases, com possível movimento relativo entre elas. Em geral, os modelos específicos de mudança de fase multi-componente utilizam-se da teoria da mistura para tratar a existência de duas fases concomitantemente. Torna-se evidente que, para a solução deste problema, uma série de considerações a nível microscópico terão de ser incorporadas nas equações de transporte macroscópico. Estas aproximações e leis empíricas, semi-empíricas

descrevendo o comportamento microscópico diferenciam os diversos modelos [66-74].

Algumas comparações com resultados experimentais são apresentadas na literatura [72,73]. Porém, elas demonstram o quanto os modelos físico/matemáticos desenvolvidos ainda não conseguem prever bem a solução do problema de mudança de fase multi-componente. Esta observação também foi feita em um trabalho publicado por Viskanta [24] em 1988, o qual apresentou um importante resumo do estado da arte em fusão/solidificação de metais.

### Quanto à Formulação

Dois métodos matemáticos são comumente utilizados na solução de problemas de mudança de fase, diferindo-se basicamente na escolha da variável dependente usada na equação de conservação da energia. Um deles se baseia na temperatura e o outro na entalpia. Na realidade, são muitas as diferenças destas duas abordagens, que serão vistas a seguir. Existem ainda outros métodos, menos utilizados, que serão apenas citados.

No método clássico, também conhecido como formulação em temperatura, método de Stefan, formulação forte, solução em múltiplas regiões, formulação em dois domínios, etc, as equações de conservação são escritas para cada domínio (sólido e líquido) separadamente, com condições de acoplamento das soluções na interface. Desta forma, modela-se condução no sólido, condução/convecção no líquido e um balanço térmico e de massa na interface. A grande dificuldade deste método é decorrente da necessidade de localizar a frente de mudança de fase que divide os dois domínios e cuja posição não é conhecida "a priori", sendo dependente da própria solução do problema. Isto faz com que esta formulação necessariamente recaia na utilização de malhas adaptativas, capazes de "acompanhar" o deslocamento da interface no tempo e no espaço.

Os trabalhos [25-64] aplicam esta metodologia na solução de diversos problemas de fusão/solidificação. Eles diferem significativamente no grau de complexidade dos fenômenos físicos modelados e na forma de gerar a malha adaptativa. É comum a aplicação desta formulação a apenas um dos domínios de solução. Em problemas de fusão, estuda-se apenas o domínio líquido, considerando-se o sólido como isotérmico, à temperatura de fusão. A condução de calor no sólido é desprezada e o balanço energético na interface estabelece que todo calor é usado para fusão de material sólido. Pode-se ainda considerar ou não a convecção no domínio líquido. Exemplos de aplicações deste modelo simplificado em soluções analíticas são encontrados em [2,3], e em soluções numéricas citam-se [30-43]. Em problemas de solidificação, estuda-se apenas o domínio sólido, considerando-se o líquido como isotérmico e estacionário. Neste caso, tanto a condução quanto a convecção de calor no líquido são desprezadas. O balanço energético na interface estabelece que todo calor é convertido em solidificação de parte do líquido junto à frente de mudança de fase. Exemplos de soluções analíticas com estas simplificações são encontrados

em [2,3] e podem-se citar as referências [26-29] como exemplos de soluções numéricas. Como exemplos de trabalhos que utilizam o método da temperatura e realizam a formulação dos dois domínios de solução, citam-se as referências [44-59]. Na maioria dos casos em que se modelam os dois domínios, a convecção no líquido não é desprezada. A menos de soluções analíticas, que podem ser encontradas em [2,3], as quais comumente se restringem a simples condução nos dois domínios, como é o caso da solução de Newmann citada na seção 1.1.

O método da temperatura é de difícil aplicabilidade a problemas de mudança de fase em materiais multi-componentes. Neste caso, a malha teria de se adaptar a duas fronteiras móveis, necessitando formulação em três domínios e balanço em duas interfaces. Citam-se as publicações [60,61] que tratam de mudança de fase de soluções binárias de uma maneira simplificada, mostrando que, apesar das dificuldades, é possível a utilização do método da temperatura neste caso.

A formulação em temperatura é apresentada e detalhada no capítulo 2. O capítulo 3 apresenta os diversos métodos de geração/adaptação de malha usados em problemas de mudanças de fase com formulação em temperatura, dando uma idéia do atual estágio de desenvolvimento do método.

O método da entalpia foi desenvolvido como uma alternativa ao método clássico, com o intuito de superar dificuldades numéricas associadas a malhas adaptativas. Este método se aplica a soluções com malha fixa, por remover a necessidade de satisfazer explicitamente às condições na frente de mudança de fase. A formulação em entalpia permite utilizar procedimentos comuns de solução de equações de conservação, sem a necessidade de transformações ou outras manipulações matemáticas. É também conhecida como formulação fraca, solução com malha fixa, formulação em um domínio, formulação contínua, *Fixed-Domain Method* [22], etc.

O método da entalpia leva em conta o calor latente de mudança de fase na equação de energia calculando o valor da entalpia latente nodal para cada célula computacional, de acordo com a temperatura da célula. Sob mudança de fase, a entalpia latente nodal da célula é ajustada, levando em conta a produção ou absorção de calor latente, refletindo na equação de energia como uma fonte ou um sumidouro de calor. Isto faz com que não seja necessário realizar um balanço de energia na frente de mudança de fase [82]. O calor latente é levado em conta na avaliação do termo fonte, quando se utiliza a entalpia sensível como variável dependente, como feito na maioria dos trabalhos, [79-92]. Por outro lado, pode-se utilizar a entalpia total como variável dependente, como em [75-78]. Neste caso, o calor latente de mudança de fase é levado em consideração através da própria variável do problema, assim, não há necessidade de avaliá-lo independentemente para cada célula. As duas formulações serão apresentadas no Capítulo 3.

Uma dificuldade do método da entalpia, quando a convecção é considerada no líquido, é automatizar a condição de velocidade nula no domínio sólido, pois uma mesma formulação contendo termos difusivos e termos convectivos é aplicada a todo o domínio. Certamente, os termos

convectivos devem se anular automaticamente em células do domínio sólido. Métodos específicos para efetuar este "controle" da velocidade são apresentados na seção 3.6.

Outro problema que pode ocorrer pela utilização desta metodologia é a oscilação numérica da solução na região de mudança de fase, conforme mostrado em diversos trabalhos, citando-se, por exemplo [75,87]. Estas oscilações numéricas dificultam a convergência da solução e podem provocar o chamado "efeito escada" devido à não concordância da frente com a malha, na solução junto à frente de mudança de fase. Em outros trabalhos tentou-se solucionar este problema propondo-se algoritmos mais sofisticados [79-81].

Existem muitas aplicações do método da entalpia na solução de problemas de mudança de fase [82-96], inclusive algumas levando em consideração a existência da região intermediária, quando se referem a materiais multi-componentes [65-74]. Todas estas referências citadas utilizam a formulação da entalpia sensível. A abordagem da entalpia total é aplicada em alguns trabalhos [75-78], sendo bem menos empregada que a entalpia sensível.

É importante ressaltar que alguns trabalhos recentes [86,90,91] utilizam a formulação em entalpia, porém, com a equação da energia expressa em termos da temperatura como variável dependente. Evidentemente não há qualquer modificação no método devido à escolha da variável dependente, seja temperatura, seja entalpia sensível. A utilização da entalpia sensível foi tão popular por muitos anos mais por questões históricas.

Comparações entre o método clássico, ou da temperatura, e o método da entalpia são apresentadas em alguns trabalhos [97-99].

O capítulo 2 trata da teoria ligada à formulação em entalpia apresentando as duas abordagens, a da entalpia sensível e a da entalpia total, e a formulação com a temperatura como variável dependente. Além disto apresenta métodos para tratamento da velocidade que proporcionam velocidade nula no domínio sólido. No Capítulo 3 faz-se uma análise crítica das metodologias empregadas junto à formulação em entalpia, além de uma comparação com o método da temperatura.

Existem ainda outros métodos de se formular problemas de mudança de fase, menos difundidos e menos utilizados. Por exemplo, em [101] apenas a condução de calor é modelada no domínio líquido, sendo a convecção natural prevista por meio de uma condutividade térmica equivalente certamente maior que a propriedade do material. Esta formulação é bastante simples, porém, necessita de uma avaliação correta do valor da condutividade térmica equivalente, o que só é possível caso a caso, por meio de experimentação ou empiricamente.

Em [102-107] utiliza-se o método do calor específico, ou da capacidade térmica, no qual o calor latente de mudança de fase é levado em conta por meio de variação do calor específico do material. Este método é semelhante ao da entalpia por não necessitar de condições de balanço energético e de

massa na frente de mudança de fase. Porém, apresenta problemas de convergência na solução de mudança de fase isotérmica. Além disto, ambos os trabalhos desconsideram a existência de convecção natural no domínio líquido.

Em [108] um método de correção da temperatura foi utilizado para levar em conta a geração de calor latente. Este método consiste em dois passos de cálculo do campo de temperatura, para cada intervalo de tempo. No primeiro, a temperatura é prevista sem considerar o calor latente de mudança de fase. No segundo passo, o campo de temperatura é corrigido para seu valor verdadeiro, levando em conta a existência do calor latente de mudança de fase. O método foi aplicado usando elementos finitos. A convecção no líquido não foi considerada.

### 1.2.2- Modelos Numéricos

Como visto na seção anterior, devido à grande complexidade física dos problemas de mudança de fase, comumente se recorrem a métodos numéricos para modelá-los. Estes métodos são usados basicamente em dois níveis, métodos para aproximação (discretização) das equações físicas e métodos para geração e adaptação da malha. Através de uma revisão bibliográfica de trabalhos na área de mudança de fase, pode-se verificar que estes, em geral, utilizam modelos numéricos bastante simples, como apresentado a seguir, com relação às formulações em entalpia e em temperatura.

A formulação em entalpia tradicionalmente tem sido associada a malhas fixas, e tem sido aplicada em geometrias simples com malhas ortogonais em coordenadas cartesianas ou cilíndricas. Foram encontrados na literatura poucos trabalhos que utilizam o método da entalpia associado a coordenadas generalizadas para tratamento de geometrias arbitrárias [74,93], sendo que o primeiro utiliza malha adaptável para captar melhor efeitos convectivos. Mas, de uma forma geral, somente o primeiro nível de métodos numéricos tem sido utilizado, apenas com a finalidade de discretização das equações físicas, seja por meio diferenças finitas convencionais [82], volumes finitos [65-74, 83-92] ou elementos finitos [94-96]. Ao se fazer uma revisão bibliográfica de trabalhos ligados ao método da entalpia, verifica-se uma certa falta de generalidade das aplicações, sendo, na sua grande maioria, relativas a cavidades retangulares. Além disto, alguns trabalhos mostram ser o método da entalpia muito dispendioso em termos de tempo de computação, além de relatarem alguns problemas de convergência.

Já a formulação em temperatura impõe a utilização de uma malha adaptada à posição da frente de mudança de fase, na qual é feito um balanço de massa e energia. Isto quer dizer que os dois níveis de métodos numéricos são necessários. Para discretização das equações físicas também são encontrados exemplos de diferenças finitas convencionais [25-27,29,30,32-34,36,37,40,44], volumes finitos [28,35,38,39,45-61] e elementos finitos [62-64]. Verifica-se

que a idéia de malha móvel, em problemas de mudança de fase, tem estado diretamente ligada à formulação em temperatura.

Além disto, a utilização da formulação em temperatura para solução de problemas de mudança de fase impõe uma série de considerações do ponto de vista numérico, de forma a desenvolver uma metodologia capaz de acompanhar o deslocamento da interface no decorrer da solução. Existem diferentes maneiras de tratar o acoplamento entre a solução do problema físico e o movimento da frente de mudança de fase. A maioria dos trabalhos utiliza a aproximação da fronteira estacionária, que desconsidera o movimento da frente de mudança de fase em cada intervalo de solução. Mediante o balanço dos fluxos de calor resultantes na interface, calcula-se a sua nova posição para o próximo instante de tempo. Esta aproximação gera malhas móveis, porém, não dependentes do tempo, tendo sido utilizada nos trabalhos [32-38,43,45]. As referências [25,29,40-42] fazem uso de malhas realmente dependentes do tempo, em que a solução se dá em termos do movimento relativo entre o escoamento e a malha. As metodologias numéricas para geração/adaptação da malha, utilizadas em problemas de mudança de fase com formulação em temperatura geralmente se baseiam em transformações de coordenadas simples, apenas com a finalidade de tornar o domínio de solução fixo. Isto é conseguido, por exemplo, através da transformação de Landau que normaliza uma das coordenadas com relação à posição da frente de mudança de fase. A maioria dos trabalhos utiliza esta transformação, como nas referências [25,27,28,30-36,43-45,47]. Alguns poucos trabalhos utilizam transformação de coordenadas generalizadas [29,38-42], porém, destes, apenas [29,40-42] usam métodos capazes de tratar geometrias arbitrarias, fazendo a geração de malha coincidente com a fronteira através do método elíptico.

No capítulo 3 deste trabalho são apresentados os métodos mais usuais de acompanhar a fronteira móvel e de fazer a geração/adaptação da malha em soluções de problemas de mudança de fase com a utilização da formulação em temperatura.

O método de volumes finitos será utilizado nesta tese para discretização de equações físicas. No capítulo 6 são apresentados detalhes a respeito da metodologia numérica empregada.

### **1.3 - OBJETIVOS DO TRABALHO**

Com base em um levantamento bibliográfico, conclui-se que existem duas correntes bem definidas, dividindo claramente a área em função da modelação utilizada. Criou-se um antagonismo entre o método da temperatura e o da entalpia. Há anos vem-se pesquisando sobre estas duas linhas distintas, sem contribuições significativas no sentido de uma metodologia realmente nova, com uma nova concepção. As duas metodologias existentes apresentam limitações e uma série de dificuldades numéricas. Este assunto será tratado com maior profundidade na seção 3.3, fazendo-se uma análise comparativa dos dois métodos. Soluções numéricas de problemas envolvendo mudança de fase

requerem grande tempo de processamento, e podem apresentar dificuldade de convergência. Por exemplo, usando dados de Viswanath & Jaluria [99], para a simulação de 19 min. de tempo real de solidificação consomem-se 7 horas de CPU de um computador VAX 11/780.

A idéia inicial deste trabalho era a de, com base nas metodologias já desenvolvidas, utilizando formulação em entalpia, acrescentar avanços numéricos importantes tais como, coordenadas generalizadas para tratamento de geometrias complexas, e malha adaptativa para diminuir dificuldades numéricas junto à frente de mudança de fase. Porém, após vários testes, concluiu-se que havia muitos problemas na metodologia numérica com a formulação da entalpia. A solução numérica era altamente instável e apresentava enorme dificuldade de convergência em alguns instantes de tempo, quando a frente de mudança de fase teria de mudar de volume na malha. O método não se mostrou suficientemente robusto para um bom funcionamento com o acréscimo de mais detalhes numéricos como malha móvel, por exemplo.

Tornou-se evidente a necessidade de desenvolvimento de um novo método que tratasse melhor a existência de uma frente de mudança de fase se movendo no domínio da solução. Prevvia-se que este não seria um caminho fácil. A priori não se poderia garantir a criação de um método totalmente novo numa área em que se pesquisa há mais de 20 anos, dentro de duas metodologias, praticamente sem grandes variações. O que se observou no decorrer destes anos foi um aumento óbvio da capacidade computacional, possibilitando soluções mais completas, que inicialmente seriam proibitivas. Esta história é apresentada de maneira crítica no capítulo 3, e a idéia básica do novo método encontra-se descrita no capítulo 4.

Iniciou-se questionando a segregação entre as duas metodologias existentes. Ambas possuem vantagens e desvantagens. Procurou-se, então, criar um método intermediário, ou seja, com as vantagens do método da entalpia, porém, com um tratamento especial para a discretização numérica junto à interface. Na seção 4.1 mostra-se que uma aproximação por diferenças centrais simples das derivadas junto à interface pode ser uma fonte de erros na solução da equação da energia em problemas com mudança de fase. Além disto, uma interpretação física rigorosa forneceu subsídios para optar pela melhor forma de avaliar os fluxos de calor que compõem o balanço energético em um volume em mudança de fase. Este assunto é tratado na seção 4.3.

Os passos para a criação do novo método com formulação única para todo o domínio e acompanhamento da posição da interface são apresentados no capítulo 4. Este será chamado "método em um domínio com acompanhamento da frente" ("front-tracking one-domain method").

Resultados de problemas unidimensionais são apresentados na seção 4.4, e comparados com a solução analítica e outras soluções pelo método da entalpia. Fica evidente a superioridade do novo método, principalmente no que tange à previsão numérica do histórico da temperatura em um ponto.

O novo método foi generalizado, permitindo tratar geometrias bidimensionais, arbitrárias, como apresentado no capítulo 5. O capítulo 6 versa



sobre a metodologia numérica envolvida no novo método, no qual utiliza-se discretização em volumes finitos, coordenadas generalizadas, malha móvel, variáveis colocalizadas, algoritmo SIMPLEC para tratar o acoplamento P-v, [109,110].

Finalmente, deseja-se ressaltar que a principal contribuição deste trabalho é a abertura de um novo caminho para a simulação numérica de problemas com mudança de fase. Um novo método é proposto, o qual não se encontra em nenhuma das duas linhas em que se vinha historicamente pesquisando. Este é um fato novo na área, que poderá permitir grandes avanços futuros. O novo método apresenta excelentes resultados unidimensionais e boas soluções bidimensionais. É evidente que seriam ainda necessários diversos refinamentos no método para aumentar ainda mais a sua aplicabilidade. Este assunto fica em aberto para possíveis estudos futuros, uma vez que o esforço para o desenvolvimento de um novo método requer enorme carga de trabalho, pois as mais diversas situações devem ser testadas a fim de se chegar a resultados conclusivos.

## **CAPÍTULO 2**

### **FORMULAÇÕES EM TEMPERATURA E EM ENTALPIA**

#### **2.1- CONSIDERAÇÕES GERAIS**

Neste capítulo serão apresentadas as formulações em temperatura e em entalpia para problemas de fusão/solidificação em coordenadas cartesianas em duas dimensões. Sistemas coordenados generalizados serão tratados no capítulo 5. A seguir, serão apresentadas e discutidas as considerações e aproximações feitas nas formulações de uma forma geral.

**Propriedades termofísicas constantes** (independentes da temperatura). Com relação às propriedades termofísicas existem duas maneiras de se fazer esta aproximação:

1) Usando o mesmo valor tanto no domínio sólido quanto no líquido. Esta aproximação é válida, para problemas de mudança de fase onde não ocorrem grandes variações no valor da temperatura, ficando sempre próximo do valor da temperatura de fusão/solidificação.

2) Usando valores constantes em cada fase, porém, diferentes entre si. Ocorrendo mudança de fase, é comum uma grande variação nas propriedades termodinâmicas. Mostra-se como exemplo o valor da relação de difusividades térmicas sólido/líquido ( $\chi = \alpha_s / \alpha_L$ ) para metais comuns:  $\chi = 1,96$  para Al,  $\chi = 1,77$  para Cu,  $\chi = 0,86$  para Fe,  $\chi = 2,08$  para Zn,  $\chi = 1,74$  para Sn [87] e para parafinas  $\chi = 0,36$  aproximadamente. [45] A utilização de valores diferentes para as propriedades nas fases sólida e líquida é direta no método da temperatura, por utilizar equações independentes para cada domínio. Já no método da entalpia existe uma certa dificuldade de implementação de valores diferentes das propriedades nas duas fases, pois utiliza-se apenas uma equação para todo o domínio, existindo volumes nos quais ambas as fases coexistem. Os trabalhos [87,91] apresentam soluções para esta dificuldade. Em [91] Voller & Swaminathan mostram que a utilização da transformação de Kirchhoff para aproximar as propriedades na interface leva aos melhores resultados. A maioria dos trabalhos que modelam fusão/solidificação de substâncias multi-componentes aplicam a teoria da mistura no cálculo das propriedades termofísicas. Desta forma, estas propriedades são função da fração de sólido e de líquido existentes em cada volume do domínio. São exemplos desta metodologia de cálculo das propriedades termofísicas as referências [66-71].

**Aproximação de Boussinesq** para tratar a convecção natural no domínio líquido. Esta é uma prática comum na solução de problemas com convecção natural, tendo sido estudada e validada por Gray e Giorgini [111]. Nesta aproximação, a massa específica do fluido é considerada constante, exceto no termo referente à força de empuxo na equação de conservação da quantidade de movimento. Esse termo é dado por

$$F_g = \rho_o g \beta_o (T - T_o) \quad (2.1)$$

onde os parâmetros com sub-índice "o" são valores de referência. Desta forma, o fluido é tratado como incompressível, apenas aparecendo os efeitos de compressibilidade no termo de empuxo.

**As variações no volume devido à mudança de fase não são consideradas.**

Um material pode reduzir o seu volume se  $\rho_s / \rho_L > 1$ , ou aumentá-lo se  $\rho_s / \rho_L < 1$  durante um processo de solidificação (o contrário ocorrendo para a fusão). Frequentemente uma redução no volume durante a solidificação de um material provoca o aparecimento de vazios ou bolhas de ar. A modelação de tal fenómeno teria de levar em consideração a existência do líquido, do sólido e do ar no domínio de solução, o que complicaria consideravelmente o problema em questão, como apontado em [24,47]. Na verdade, tal abordagem não foi feita em nenhum trabalho de conhecimento do autor. A maioria dos trabalhos faz  $\rho_s = \rho_L$ , mas, mesmo os que usam valores de densidade diferentes para sólido e líquido [45,46,70], não levam em consideração a variação de volume, decorrente deste fato, na modelação do problema. Apenas alguns trabalhos recentes modelam o aumento do volume decorrente da solidificação do material, como em Kim et al [59], utilizando método da temperatura, e em Sheen & Hayakawa [104], utilizando o método da capacidade térmica.

**Escoamento laminar no domínio líquido.** No caso, o regime de escoamento é função do número de Rayleigh. Evidências experimentais demonstram que em cavidades retangulares, por exemplo, o escoamento é laminar até elevados valores do número de Rayleigh, com a transição para turbulência, segundo trabalhos experimentais [112], se dando a partir de  $Ra \approx 10^{10}$ . Dado da mesma ordem é encontrado em recente trabalho analítico/experimental publicado por Zhang & Bejan [15].

**Os termos de dissipação viscosa são desprezados.**

**O fluido é Newtoniano.**

## 2.2- A CONSERVAÇÃO DE ENERGIA EM PROBLEMAS COM MDF

A equação de conservação da energia tem sido representada de três maneiras, dependendo da variável dependente adotada, podendo-se usar a entalpia total  $E$ , a entalpia sensível  $h$ , ou a temperatura  $T$ . As três serão tratadas nesta seção.

Seja  $\forall$  um volume arbitrário, com área superficial  $S$ , no qual ocorre uma mudança de fase, como representado na Fig. 2.1.

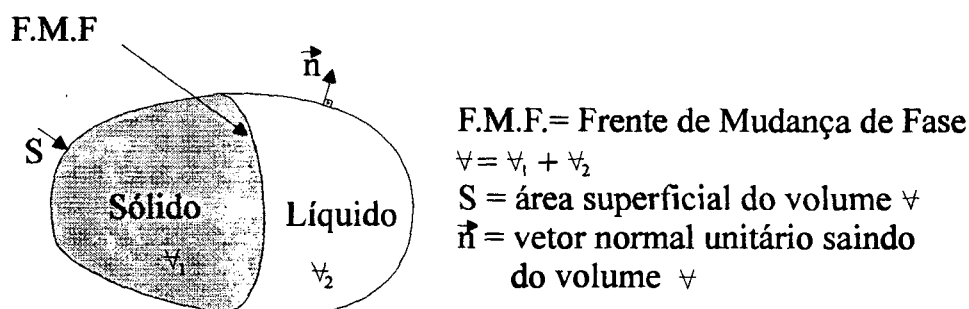


Fig. 2.1- Volume arbitrário com mudança de fase

Procedendo-se a um balanço de entalpia total  $E$  neste volume arbitrário  $\forall$ , com área superficial  $S$ , é fácil ver que [2,3]

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\forall} \rho E d\forall = \int_S -\rho E \vec{V} \cdot \vec{n} dS + \int_S k \nabla T \cdot \vec{n} dS \quad (2.2)$$

Sendo o volume  $\forall$  fixo no tempo e no espaço, a derivada temporal pode passar para dentro da integral e, usando o teorema da divergência, a Eq. (2.2) fica

$$\int_{\forall} \left[ \frac{\partial}{\partial t} (\rho E) + \nabla \cdot (\rho \vec{V} E) - \nabla \cdot (k \nabla T) \right] d\forall = 0 \quad (2.3)$$

Para um volume infinitesimal, conclui-se que

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho E) + \nabla \cdot (\rho \vec{V} E) = \nabla \cdot (k \nabla T) \quad (2.4)$$

Esta é a equação de conservação de energia em termos da entalpia total  $E$  como variável dependente, na forma vetorial, da qual advém a formulação em entalpia total.

### 2.2.1- Formulação em Entalpia Total

A equação da energia com a entalpia total  $E$  como variável dependente, Eq. (2.4), não apresenta termos fonte. A energia gerada na mudança de fase, energia latente, é considerada através da variação da própria variável dependente da equação. Para a formulação em entalpia total, tal como utilizada em [76-78], falta ainda relacionar a temperatura  $T$  à variável dependente da Eq. (2.4), a entalpia total  $E$ . Sabe-se que

$$E = h + H \quad (2.5)$$

Lembrando que a entalpia latente  $H$  é nula no estado sólido e vale  $\lambda$  no estado líquido, e que  $h = c_p T$ , pode-se dizer resumidamente, considerando o calor específico constante em cada fase, que:

$$\begin{aligned} \text{para sólido: } H &= 0, \quad E - E_0 = h = c_s(T - T_f) \\ \text{para líquido: } H &= \lambda, \quad E - E_0 = h + \lambda = c_L(T - T_f) + \lambda \end{aligned}$$

Porém, a relação entre a temperatura e a entalpia total depende do tipo de mudança de fase, se isotérmica ou não. Neste trabalho apenas o caso isotérmico será tratado, para o qual pode-se afirmar que

$$T = \begin{cases} T_f + E/c_s, & E \leq c_s T_f & (\text{sólido}) \\ T_f, & c_s T_f < E < c_s T_f + \lambda & (\text{mudança de fase}) \\ T_f + (E - \lambda)/c_L, & E \geq c_s T_f + \lambda & (\text{líquido}) \end{cases} \quad (2.6)$$

ou, considerando como referência para a temperatura de mudança de fase  $T_f=0$ , resulta entalpia de referência nula no material sólido a esta temperatura, isto é,  $E_0 = c_s T_f = 0$ , obtendo-se

$$T - T_f = \begin{cases} E/c_s, & E \leq 0 & (\text{sólido}) \\ 0, & 0 < E < \lambda & (\text{mudança de fase}) \\ (E - \lambda)/c_L, & E \geq \lambda & (\text{líquido}) \end{cases} \quad (2.7)$$

Agora, introduz-se a definição de “temperatura de Kirchhoff”, que, para mudança de fase isotérmica e condutividades térmicas constantes em cada fase, fica

$$T^* = \int_{T_f}^T k(\zeta) d\zeta = \begin{cases} k_S(T - T_f), & T < T_f, \text{ (sólido)} \\ 0, & T = T_f, \text{ (mudança de fase)} \\ k_L(T - T_f), & T > T_f, \text{ (líquido)} \end{cases} \quad (2.8)$$

Usando as relações (2.7) em (2.8), obtém-se

$$T^* = \begin{cases} k_S E / c_S, & E \leq 0 \quad \text{(sólido)} \\ 0, & 0 < E < \lambda \quad \text{(mudança de fase)} \\ k_L (E - \lambda) / c_L, & E \geq \lambda \quad \text{(líquido)} \end{cases} \quad (2.9)$$

A Eq. (2.4), em termos da “temperatura de Kirchhoff”  $T^*$ , fica

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho E) + \nabla \cdot (\rho \vec{V} E) = \nabla^2 T^* \quad (2.10)$$

e, fazendo  $T^*$  uma função linear da entalpia total  $E$ , da forma

$$T^* = \Omega(E) \cdot E + \psi(E) \quad (2.11)$$

a equação da energia em termos da entalpia total resulta

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho E) + \nabla \cdot (\rho \vec{V} E) = \nabla^2 (\Omega E) + \nabla^2 \psi \quad (2.12)$$

Esta equação é função apenas da entalpia total  $E$ , não necessitando de cuidados especiais na sua solução. As expressões para as funções  $\Omega(E)$  e  $\psi(E)$ , ficam:

$$\Omega(E) = \begin{cases} k_S / c_S, & E \leq 0 \quad \text{(sólido)} \\ 0, & 0 < E < \lambda \quad \text{(mudança de fase)} \\ k_L / c_L, & E \geq \lambda \quad \text{(líquido)} \end{cases} \quad (2.13)$$

$$\psi(E) = \begin{cases} 0, & E \leq 0 \quad \text{(sólido)} \\ 0, & 0 < E < \lambda \quad \text{(mudança de fase)} \\ -\lambda k_L / c_L, & E \geq \lambda \quad \text{(líquido)} \end{cases} \quad (2.14)$$

### 2.2.2- Formulação em Entalpia Sensível

A formulação em entalpia sensível é obtida voltando-se à Eq. (2.4), repetida abaixo,

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho E) + \nabla \cdot (\rho \vec{V} E) = \nabla \cdot (k \nabla T) \quad (2.4)$$

Lembrando que  $E = h + H$ , isto é, a entalpia total  $E$  é a soma da entalpia sensível  $h$  com a latente  $H$ , e ainda que a entalpia sensível se relaciona com a temperatura através do calor específico,  $h = c_p T$ , a equação acima, em termos da entalpia sensível como variável dependente, fica

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho h) + \nabla \cdot (\rho \vec{V} h) - \nabla \cdot \left( \frac{k}{c_p} \nabla h \right) = S^h \quad (2.15)$$

onde  $S^h = -\frac{\partial}{\partial t}(\rho H) - \nabla \cdot (\rho \vec{V} H)$

O termo-fonte  $S^h$  é composto de um termo transiente e termos convectivos com relação à entalpia latente. Para mudança de fase isotérmica (substâncias puras), os termos convectivos do termo-fonte são usualmente desprezados devido à velocidade ser muito pequena próximo à frente de mudança de fase, onde existe variação de  $H$ , e no líquido, onde as velocidades não são desprezíveis, a entalpia possui um valor constante  $H = \lambda$ , isto é, sua variação é nula. Somente no caso de mudança de fase em substâncias multicomponentes, quando existe a região intermediária, os termos convectivos do termo-fonte podem ser significativos.

Verifica-se que na solução é necessário avaliar não só a entalpia sensível ponto a ponto, mas também o valor da entalpia latente  $H$ . Como se sabe, a entalpia latente é função da temperatura,  $H = F(T)$ , existindo dois casos, a mudança de fase isotérmica, que ocorre em substâncias puras ou eutéticas, e a não isotérmica, ocorrendo em materiais multicomponentes. Neste trabalho, trata-se apenas do caso de mudança de fase isotérmica.

Para mudança de fase isotérmica, o termo-fonte fica apenas

$$S^h = -\frac{\partial}{\partial t}(\rho H) \quad (2.16)$$

É comum a utilização da fração de líquido, ao invés da entalpia latente na representação do termo-fonte. Define-se fração de líquido como  $f = H/\lambda$ , de tal forma que, para mudança de fase isotérmica,

$$H = F(T) = \begin{cases} \lambda, & T > T_f \\ 0, & T < T_f \end{cases} \quad f = \begin{cases} 1, & \text{(líquido)} \\ 0, & \text{(sólido)} \end{cases}$$

Durante a mudança de fase  $0 < H < \lambda$ ,  $T = T_f$ . Esta é uma função descontínua, como representado na Fig.2.2.

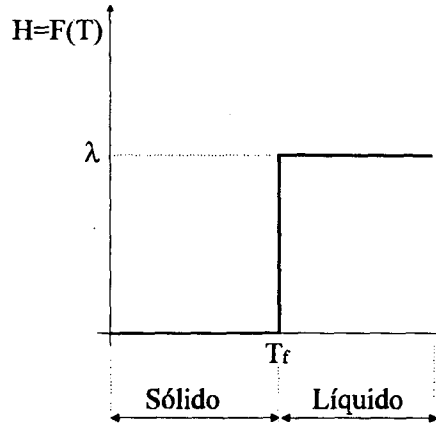


Fig. 2.2 - Função da variação da entalpia latente com a temperatura para mudança de fase isotérmica.

Então, se a fração de líquido encontra-se entre 0 e 1 ( $0 < f < 1$ ) significa que o material está em mudança de fase, e  $f$  representa a fração volumétrica do material no estado líquido.

É conveniente apresentar o termo-fonte da Eq. (2.16) em termos da fração de líquido  $f$ , devido à facilidade de interpretação física. Assim, o termo-fonte fica

$$S^h = -\frac{\partial}{\partial t}(\rho H) = -\lambda \frac{\partial}{\partial t}(\rho f) \quad (2.17)$$

Agora para escrever a equação de conservação de energia em termos da temperatura como variável dependente, substitui-se  $h=c_p T$  na Eq.(2.15), obtendo-se

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho c T) + \nabla \cdot (\rho \vec{V} c T) - \nabla \cdot (k \nabla T) = -\lambda \frac{\partial}{\partial t}(\rho f) \quad (2.18)$$

Esta tem sido a equação de partida para o método da entalpia em alguns trabalhos recentes [86,90,91]. Ao invés da entalpia sensível, esta equação usa a temperatura como variável dependente. A principal vantagem é a facilidade da interpretação dos resultados, por ser a temperatura uma variável mais usual que a entalpia.

A abordagem em entalpia sensível requer uma metodologia numérica específica para avaliar o termo-fonte  $S^h$ , dado na Eq. (2.17). Em uma solução numérica iterativa, parte-se de uma estimativa inicial para  $S^h$ , e, com a equação



da energia, calcula-se  $h$ . Para completar o ciclo computacional, é necessário atualizar  $H$  iterativamente, com relação ao valor previsto de  $h$ . Na verdade, deve-se observar que o maior problema reside na avaliação do termo transiente do termo-fonte, pois envolve o valor da entalpia latente no mesmo nível iterativo da solução. É fácil perceber que esta avaliação deve ser feita de maneira cuidadosa, pois pode facilmente levar a não convergência da solução. Devido a este problema se agravar em casos de mudança de fase isotérmica, inicialmente a formulação em entalpia não era aplicada nesses casos [51], até que foram desenvolvidos métodos numéricos mais eficientes, capazes de garantir a convergência da solução também para regiões intermediárias "estreitas" ou inexistentes. No capítulo 3 serão vistos métodos alternativos para a avaliação do termo-fonte no método da entalpia.

### 2.2.3- Formulação em Temperatura

Para a formulação em temperatura, a equação da energia é resolvida em domínios nos quais não existe mudança de fase, com o termo-fonte da Eq. (2.18), então, igual a zero. Assim se obtêm as equações de conservação da energia para a formulação em temperatura. (Nas equações apresentadas a seguir, utiliza-se o sub-índice "S" referindo-se ao domínio sólido, e "L", com relação ao domínio líquido, porém, apenas quando for realmente necessário para o entendimento. O sub-índice "f" se refere à frente de mudança de fase.)

Para o domínio líquido

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_L c_L T) + \nabla \cdot (\rho_L \tilde{V} c_L T) = \nabla \cdot (k_L \nabla T) \quad (2.19)$$

Para o domínio sólido

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_S c_S T) + \nabla \cdot (\rho_S \tilde{V} c_S T) = \nabla \cdot (k_S \nabla T) \quad (2.20)$$

Para a interface

#### Continuidade da temperatura

Inicialmente, a temperatura na interface sólido/líquido deve ser constante e igual à temperatura de mudança de fase  $T_f$ , isto é,

$$T_S(x, y, t) = T_L(x, y, t) = T_f \quad (2.21)$$

### Balanço de Energia

O balanço de energia na interface pode ser representado como [3]

$$\rho_L E_L (v_f - v_L) - \rho_S E_S v_f = \left( k \frac{\partial T}{\partial n} \right)_S - \left( k \frac{\partial T}{\partial n} \right)_L \quad (2.22)$$

Usando o balanço de massa, apresentado posteriormente, na Eq. (2.26), pode-se eliminar a velocidade do líquido  $v_L$ , da Eq. (2.22), chegando-se a

$$\rho_S (E_L - E_S) v_f = \left( k \frac{\partial T}{\partial n} \right)_S - \left( k \frac{\partial T}{\partial n} \right)_L \quad (2.23)$$

Definindo  $\lambda = E_L - E_S$ , que representa o calor latente de fusão do material, a Eq. (2.23) fica

$$\rho_S \lambda v_f = \left( k \frac{\partial T}{\partial n} \right)_S - \left( k \frac{\partial T}{\partial n} \right)_L \quad (2.24)$$

Deve-se ressaltar que os gradientes são medidos em relação à direção normal à interface, assim como a velocidade da frente  $v_f$ ; e que esta equação vale indiferentemente para solidificação e para fusão.

## 2.3- CONSERVAÇÃO DA MASSA E DA QUANTIDADE DE MOVIMENTO

Quanto à conservação da massa e da quantidade de movimento as duas formulações são basicamente iguais. A única diferença é que no método da temperatura as equações de conservação da massa e da quantidade de movimento somente são aplicadas no domínio líquido, enquanto que no método da entalpia uma mesma formulação é aplicada a todo o domínio. Certamente não é fisicamente coerente a utilização destes princípios de conservação na fase sólida, então, as velocidades neste domínio devem ser nulas. Por isso, o método da entalpia necessita de um artifício numérico especialmente para isto. Existem diversos métodos para este "controle" automático da velocidade no domínio, apresentados na seção 2.4. Feita esta ressalva, pode-se passar para as formulações propriamente ditas.

### 2.3.1- Conservação da Massa

Sendo o fluido considerado incompressível, de acordo com o proposto na aproximação de Boussinesq, a conservação da massa, para qualquer das formulações fica simplesmente

$$\nabla \cdot \vec{V} = 0 \quad (2.25)$$

Para o método da temperatura, caso haja variação no valor da massa específica entre fases sólida e líquida, é necessário aplicar a conservação da massa na interface. Considerando que a frente se move com a velocidade normal a ela dada por  $v_f$ , no domínio sólido o fluxo de massa é dado por  $\rho_s v_f$  e no domínio líquido o fluxo de massa deve levar em conta a velocidade relativa entre a frente e a velocidade do líquido, dada por  $v_L$ . O balanço de massa na interface fica

$$\rho_s v_f + \rho_L (v_L - v_f) = 0 \quad (2.26)$$

### 2.3.2- Conservação da Quantidade de Movimento

Como ressaltado no início desta seção, uma formulação única é aplicada a todo o domínio no método da entalpia, ao passo que para o método da temperatura os dois domínios são modelados separadamente. Evidentemente, para o método da temperatura as equações apresentadas a seguir se aplicam ao domínio líquido, sendo desnecessária a utilização do sub-índice "L".

Considerando que a aceleração da gravidade está na direção y, obtém-se:

para a direção x

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u) + \nabla \cdot (\rho \vec{V} u) = \nabla \cdot (\mu \nabla u) - \frac{\partial p}{\partial x} \quad (2.27)$$

para a direção y

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho v) + \nabla \cdot (\rho \vec{V} v) = \nabla \cdot (\mu \nabla v) - \frac{\partial p}{\partial y} + \rho g \beta_o (T - T_o) \quad (2.28)$$

## 2.4- CONTROLE DA VELOCIDADE NO MÉTODO DA ENTALPIA

Como já foi ressaltado, o método da entalpia utiliza uma mesma formulação em todo o domínio, desconsiderando a existência de regiões com fases diferentes. Torna-se, então, necessário distingui-las automaticamente na formulação, de forma que a velocidade seja nula no sólido e, na região intermediária, o escoamento sofra alguma restrição. Existem basicamente três métodos para fazer isto, que serão vistos a seguir com detalhes e, depois, comparados.

### 2.4.1- Método do "Desligamento"

Este método foi proposto por Morgan [94], que o utilizou em soluções de problemas de mudança de fase trabalhando com elementos finitos. Ele procede da maneira mais direta possível, simplesmente igualando a zero a velocidade na região sólida.

O problema passa a ser identificar as regiões líquida e sólida. Uma maneira de fazê-lo é usando o valor da entalpia latente associada a cada célula,  $H$  (na abordagem da entalpia sensível) ou o valor da entalpia total,  $E$  (na abordagem da entalpia total). Então, a velocidade é feita igual a zero em todo volume elementar em que

$$H < A \text{ ou } E < A \quad (2.29)$$

onde  $A$  é um valor fixado na faixa  $0 < A < \lambda$ . Por exemplo, um valor  $A=0$  indica que a velocidade só é feita nula quando todo o elemento estiver sólido, para  $A=\lambda$ , a velocidade é nula desde o início da solidificação do elemento.

Este método não se aplica a problemas com região intermediária, uma vez que a velocidade ou está "ligada" - para o líquido, ou "desligada" - para o sólido.

### 2.4.2- Método da Viscosidade Variável

Um método mais sutil e mais alinhado à filosofia da metodologia da entalpia foi desenvolvido por Gartling [95], que também o utilizou trabalhando com elementos finitos. Ele faz a viscosidade ser função da temperatura, de forma que na região intermediária ela aumente, atingindo valor bastante elevado. Como consequência a velocidade é forçada a valores bem pequenos, praticamente se anulando no domínio sólido.

Na verdade, é mais interessante fazer a viscosidade função da entalpia latente do elemento,  $H$ , podendo-se aplicar a problemas de mudança de fase isotérmica ou não. Caso seja feita função apenas da temperatura, o método se

restringe a problemas com região intermediária, onde a mudança de fase se dá numa faixa de temperatura. Uma função entre viscosidade e entalpia latente pode ser a seguinte

$$\mu = \mu_L + B (\lambda - H_P) \quad (2.30)$$

Ela mostra que se o elemento estiver líquido,  $H = \lambda$ , resultando em  $\mu = \mu_L$ , e se estiver sólido,  $H = 0$ , tendo-se  $\mu = \mu_L + B\lambda$ . Sendo  $B$  uma constante de valor elevado, a viscosidade no sólido assume um grande valor, levando a velocidade a se anular na solução das equações de movimento.

### 2.4.3- Método da Lei de Darcy

Este método se baseia numa modelação da região intermediária como sendo um meio poroso, no qual vale a Lei de Darcy. Em metalurgia é uma pratica comum modelar o escoamento na região intermediária via Lei de Darcy, como pode ser visto em Mehrabian et al. [114].

Um modelo possível para um volume elementar no qual estivesse ocorrendo mudança de fase, seria o de um meio poroso com uma fração de líquido escoando numa matriz porosa. É importante observar que em uma mudança de fase com região intermediária este modelo possui significado físico, mas, para uma mudança de fase isotérmica, o modelo é apenas um artifício numérico para tratar um volume onde aparece uma fração de sólido e outra de líquido.

Um volume discreto onde esteja ocorrendo mudança de fase possui a entalpia latente dentro da faixa  $0 < H < \lambda$ . O valor de  $H$  será um indicador da quantidade de sólido existente no volume  $P$ . Mais precisamente, a fração de sólido,  $f_s$ , é dada por

$$f_s = 1 - H_P / \lambda \quad (2.31)$$

ou, a fração de líquido

$$f = H_P / \lambda \quad (2.32)$$

Este método foi inicialmente proposto por Voller et al. [83], da forma descrita a seguir.

A Lei de Darcy afirma que a velocidade do escoamento em um meio poroso é proporcional ao gradiente de pressão. Na forma vetorial, tem-se

$$\vec{V} = -\frac{\Lambda}{K} \nabla P \quad \text{ou} \quad \nabla P = -\frac{K}{\Lambda} \vec{V} \quad (2.33)$$

onde  $K$  é uma constante empírica e  $\Lambda$  é a porosidade. A porosidade do meio é considerada igual à fração de líquido, ou seja

$$\Lambda = f = H_P / \lambda \quad (2.34)$$

Basta, então, adicionar termos-fonte nas equações da quantidade de movimento  $x$  e  $y$  de forma a se levar em consideração o escoamento no meio poroso,

$$S_x = \frac{K}{\Lambda} u \quad e \quad S_y = \frac{K}{\Lambda} v \quad (2.35)$$

ou simplesmente, na forma vetorial,

$$\vec{S}_P = \frac{K}{\Lambda} \vec{V}_P \quad (2.36)$$

A porosidade  $\Lambda$  é função da entalpia latente  $H$  em cada elemento discreto, de forma que quando aumenta a fração de sólido  $H \rightarrow 0$  e  $\Lambda \rightarrow 0$ . Isto faz com que o termo-fonte domine a equação do movimento, forçando as velocidades  $u$  e  $v$  a tenderem a zero.

Duas funções para representar este comportamento do termo-fonte foram propostas por Voller et al. em [83], uma linear e outra exponencial.

#### Função linear para o termo-fonte

$$\vec{S}_P = C(\lambda - H_P) \vec{V}_P \quad (2.37)$$

#### Função exponencial para o termo-fonte

$$\vec{S}_P = C[\exp(\lambda - H_P) - 1] \vec{V}_P \quad (2.38)$$

Em [65] Voller e Prakash sugeriram ainda uma terceira função para o termo-fonte, baseada numa equação derivada da lei de Darcy, conhecida como equação de Carman-Koseny, apresentada abaixo

$$\nabla p = -C[(1 - \Lambda)^2 / \Lambda^3] \vec{V} \quad (2.39)$$

onde  $\Lambda$  é a porosidade do meio dada pela Eq. (2.34). De maneira similar à discutida anteriormente uma função para o termo-fonte, oriunda da Eq. (2.39), foi proposta em [65] na forma dada a seguir.

#### Função Carman-Koseny para o termo-fonte

$$\vec{S}_P = C[(1 - \Lambda)^2 / (\Lambda^3 + \epsilon)] \vec{V}_P \quad (2.40)$$

onde a constante  $\epsilon$  foi introduzida para evitar divisão por zero, possuindo um valor bem pequeno, da ordem de  $10^{-3}$ , por exemplo.

O valor das constantes  $C$  - não sendo necessariamente iguais nas três funções, deve ser escolhido com respeito aos seguintes fatores:

- deve ser suficientemente grande para produzir velocidades na região sólida com, no mínimo, três ordens de magnitude a menos que as velocidades na região líquida.
- não deve ser tão grande que provoque diminuição muito rápida das velocidades. O valor escolhido deve permitir um escoamento significativo na região intermediária.

#### 2.4.4- Comparação dos Três Métodos

Em [83] Voller et al. comparam quantitativamente os três métodos. Em [85] Hibbert et al. fazem apenas comentários sobre eles. As principais conclusões são listadas a seguir.

- O método do "desligamento" da velocidade produz bons resultados quando aplicado a problemas de mudança de fase isotérmica principalmente para valor de  $A = \lambda/2$ . O valor de  $A = \lambda$  acelera artificialmente a taxa de solidificação e  $A = 0$  o faz para a taxa de fusão, não sendo, por isso, valores aconselháveis. Não é considerado um método elegante por não ser "automático", por não possuir aplicabilidade em problemas com região intermediária e por ser muito abrupto, apenas "ligando" ou "desligando" a velocidade em cada elemento computacional.
- O método da viscosidade variável provoca variação suave da velocidade, sendo "automático" e se aplicando também a problemas com região intermediária. Porém, não demonstrou produzir bons resultados, [83], sendo de difícil implementação numérica quando se utiliza a técnica de volumes finitos com malha desconstruída, necessitando de interpolações ou médias para o cálculo da viscosidade nos pontos. Estas interpolações causam o aumento artificial da viscosidade no domínio líquido, fazendo com que o método superestime a taxa de solidificação. Além disso, é difícil criar uma função adequada e precisa para a variação da viscosidade de forma a variar adequadamente as velocidades.
- O método da Lei de Darcy tem sido o mais utilizado em toda a literatura ligada a mudança de fase sólido/líquido. A função linear para o termo-fonte não demonstrou bons resultados [83] levando a uma aceleração artificial da taxa de solidificação, semelhante à decorrente do uso do método de

desligamento com  $A = \lambda$ . A função linear não foi mais aplicada em nenhum trabalho que se tenha conhecimento. A função exponencial apresenta bons resultados, comparáveis aos obtidos pelo método do desligamento com  $A = \lambda/2$  [83] e em outras aplicações práticas, como em [85]. Ela é especialmente indicada, pois é sabido que a formação de grãos de solidificação ocorre muito mais rápido próximo ao fim da região intermediária (onde  $T \approx T_s$ ) que no início desta (onde  $T \approx T_L$ ). Por isso, a variação da velocidade é bem maior próximo à interface sólida. Numa função linear, a variação da velocidade é constante na região intermediária, o que não ocorre na prática. Em [85] esta função foi usada num problema de solidificação isotérmica. A função de Carman-Koseny é a mais difundida e a mais utilizada. Autores como Bennon e Incropera [69-71], que estudam modelos específicos para região intermediária, levando em conta fenômenos de micro/macro segregação e teoria de mistura para as fases, utilizam a aproximação de Carman-Koseny para modelar a variação da velocidade no domínio, com o método da entalpia. Também Voller et al. em [67] propõem um modelo completo, usando o termo-fonte de Carman-Koseny nas equações de conservação da quantidade de movimento.



## CAPÍTULO 3

### ANÁLISE DOS PRINCIPAIS MÉTODOS

#### 3.1- CONSIDERAÇÕES GERAIS

Historicamente os métodos de solução de problemas envolvendo mudança de fase têm sido divididos em duas categorias principais, existindo diversas denominações para elas. A primeira é conhecida como "*front-tracking methods*", "método em dois domínios", ou, "método da temperatura". Nesta, os domínios sólido e líquido são formulados independentemente e as soluções são acopladas através de balanços na interface. Evidentemente, neste tipo de solução, existe a necessidade de determinar a posição da frente de mudança de fase em cada instante de tempo e a malha deve ser móvel, existindo sempre uma linha da malha coincidente com a interface sólido/líquido. Utiliza-se a temperatura como variável dependente, como mostrado no capítulo anterior. Em contrapartida, a segunda categoria, conhecida como "*fixed-domain methods*", "método em um domínio", ou, "método da entalpia", não requer a aplicação de condições na interface, aplicando apenas uma formulação em todo o domínio, usualmente utilizando a entalpia como variável dependente. Neste caso, fica evidente a vantagem de não ser necessário determinar a posição da frente de mudança de fase em cada instante da solução e de não ser necessário utilizar malha móvel, uma vez que o calor latente de mudança de fase é levado em conta através do termo fonte da equação da energia. Porém, como era de se esperar, a dificuldade passa para a correta avaliação deste termo fonte, o que vem a diferenciar os diversos métodos desta categoria.

É importante observar que estas têm sido as categorias dos métodos de solução para mudança de fase há mais de vinte anos. Poucos métodos, com concepções diferentes foram publicados. De uma maneira geral, poucas inovações foram introduzidas nas metodologias historicamente desenvolvidas. Certamente com o avanço dos recursos computacionais uma série de simplificações deixaram de ser necessárias.

Com relação ao método da temperatura, toma-se como exemplo o trabalho de Sparrow et al. [30] de 1977, que resolve a fusão ao redor de um cilindro vertical, utilizando a transformação de Landau para tratar o domínio móvel. A solução é obtida considerando a interface suave, para simplificar as derivadas da posição da interface, e o método quase estacionário para o movimento da interface. Em trabalhos recentes, como o de Kim et al. [65], de 1993, a mesma metodologia é utilizada, porém, sem as simplificações necessárias a algum tempo atrás. Pode-se ainda comparar o trabalho publicado em 1982 por Rieger et al [40], com um mais recente, de 1991, publicado por Prud'Homme et al. [63]. Novamente verifica-se uma mesma metodologia empregada, mas, ao invés da transformação de Landau, utiliza-se geração

elíptica da malha coincidente com a fronteira. Estas comparações deixam claro que há anos o método da temperatura se encontra estabelecido sem grandes alterações, apesar das soluções serem cada vez mais completas.

Uma análise semelhante para o método da entalpia mostra que entre um dos primeiros trabalhos publicados na área, em 1975, por Shamsundar & Sparrow [82], e trabalhos mais recentes, como o publicado em 1991 por Voller [90], a principal diferença está na maneira de tratar o termo fonte.

Neste capítulo serão apresentadas algumas particularidades de métodos publicados dentro das duas categorias, fazendo-se uma análise crítica e histórica do estado da arte dos métodos de solução de problemas com mudança de fase. Os métodos escolhidos para serem tratados não são necessariamente os mais importantes da área. O objetivo principal deste capítulo é mostrar, de maneira resumida, os esforços no sentido de inovações aos métodos já estabelecidos. Ao final deste capítulo é feita uma análise comparativa entre os dois métodos, da temperatura e da entalpia, mostrando vantagens e limitações de cada um.

## **3.2- O MÉTODO DA TEMPERATURA**

Os diversos trabalhos aplicando o método da temperatura a problemas com mudança de fase diferem entre si basicamente pela metodologia de geração/adaptação da malha de forma a acompanhar o movimento da interface em cada intervalo de tempo. Nesta seção serão apresentadas estas metodologias de forma resumida, a fim de cobrir os esforços feitos na área ao longo dos anos.

### **3.2.1- Métodos de Acompanhamento da Fronteira**

Estes métodos dizem respeito à forma com que a adaptatividade da malha é incluída no algoritmo numérico da solução do problema físico. Ou seja, se diferenciam na forma de tratar a dependência entre a solução do problema físico e o deslocamento da frente de mudança de fase em cada intervalo de tempo.

#### **Aproximação da Fronteira Estacionária**

Esta aproximação considera que o movimento da fronteira não influencia significativamente os campos de temperatura e velocidade no líquido durante pequenos intervalos de tempo. Ela se baseia no fato do deslocamento da

fronteira ser muito lento. Porém, isto só é verdadeiro para baixos valores do número de Stefam, dado por

$$\text{Ste} = c_L \Delta T / \lambda \quad (3.1)$$

onde  $c_L$  é o calor específico do líquido,  $\Delta T$  é a diferença de temperatura significativa do problema e  $\lambda$  é o calor latente de mudança de fase.

Neste caso, a solução em um ou nos dois domínios é obtida para um intervalo de tempo, considerando a fronteira estacionária, na posição calculada para o tempo anterior. Mediante o balanço dos fluxos de calor resultantes na interface, calcula-se a sua nova posição no tempo. Verifica-se que esta é uma aproximação não iterativa, em que a posição da fronteira é avançada com atraso com relação à solução física do problema. Para que isto não leve a erros de previsão temporal da solução, é necessário utilizar intervalos de tempo bastante pequenos para o avanço da solução. Este procedimento é adotado nas referências [30,31,44,46,47].

Dentro desta aproximação existem trabalhos que consideram ainda uma aproximação quase permanente, desprezando os termos transientes das equações para o domínio líquido. Assim, além de considerarem a fronteira estacionária, resolvem a convecção em regime permanente numa cavidade fixa, para cada intervalo de tempo. Nas referências [32-35,38,45] procede-se desta forma.

Outros trabalhos [36,37,43] utilizam uma mistura das duas aproximações. No início da fusão onde ocorre o movimento mais rápido da interface os termos transientes são considerados, porém, na solução para tempos maiores, utilizam a aproximação quase-permanente, desprezando os termos transientes das equações.

É importante ressaltar que, na aproximação da fronteira estacionária, apesar de se tratar de malha móvel, ela não é verdadeiramente dependente do tempo. Não se leva em consideração a velocidade de deslocamento da malha, ou seja, a solução não é em termos da velocidade relativa entre a malha e o escoamento.

### **Malha Dependente do Tempo**

Quando se trabalha com coordenadas dependentes do tempo, conforme será visto no capítulo 5, a solução se dá em termos do movimento relativo entre a malha e o escoamento. Isto é, a solução é dependente da velocidade da malha, cujas componentes são  $x_t$  e  $y_t$ , em cada ponto. Na aproximação da fronteira estacionária, as velocidades  $x_t$ ,  $y_t$  são feitas nulas, de forma que a solução das equações físicas fica independente do deslocamento dos pontos da malha.

Na realidade, a solução deve levar em consideração o movimento relativo. Existem duas maneiras de proceder, através de solução iterativa ou direta.

A solução iterativa é composta dos seguintes passos:

- cálculo da solução das equações físicas nos dois domínios, com a posição da fronteira e dos pontos da malha calculados no tempo anterior;
- com os balanços na fronteira, cálculo do seu deslocamento;
- cálculo das novas posições e velocidades dos pontos da malha;
- volta ao primeiro passo com as velocidades da malha atualizadas e iteração dos três primeiros passos até obter convergência da solução; e
- avanço para novo intervalo de tempo.

Os trabalhos [25,29,40-42] utilizam a solução iterativa para tratar a dependência entre a malha móvel e a solução física em problemas de mudança de fase.

Na solução direta as equações físicas do problema e equações de geração/adaptação da malha são resolvidas simultaneamente. Nenhum trabalho de conhecimento do autor aplicou este procedimento para tratar o acoplamento entre a malha móvel e a solução do problema de mudança de fase.

### **3.2.2- Métodos para Geração/Adaptação da Malha**

A seguir serão apresentados os métodos utilizados na solução de problemas de mudança de fase para adaptar a malha às modificações geométricas dos domínios, decorrente do movimento da frente de mudança de fase. Certamente não serão citados todos os métodos já utilizados para este fim, mas sim, os mais importantes e mais empregados na literatura.

#### **Transformação de Landau**

Este é o método mais freqüentemente utilizado na solução de problemas de fronteira móvel. Ele se baseia numa transformação de coordenadas, na qual uma das coordenadas é normalizada com relação à posição da frente que se deseja acompanhar, no caso, a frente de mudança de fase.

A Fig.3.1 mostra a posição da interface sólido/líquido para um dado instante em uma geometria cartesiana, (x,y).

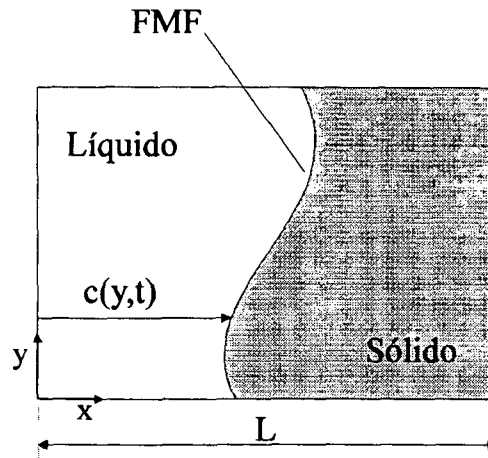


Fig. 3.1 - Posição da frente de mudança de fase numa geometria retangular.

Neste caso, as coordenadas transformadas,  $X$ ,  $Y$ , podem ser dadas por:

para o líquido

$$\begin{cases} Y = y \\ X = x/c(y,t) \end{cases} \quad (3.2)$$

para o sólido

$$\begin{cases} Y = y \\ X = (L-x)/[L-c(y,t)] \end{cases} \quad (3.3)$$

Com base nestas transformações, dadas pelas Eqs.(3.2) e (3.3), as equações para formulação em temperatura são transformadas de forma a ficarem em função de  $X$  e  $Y$  e de expressões envolvendo as derivadas da posição da frente,  $\partial c/\partial t$ ,  $\partial c/\partial y$ ,  $\partial^2 c/\partial y^2$ .

A transformação apresentada nas Eqs.(3.2) e (3.3) é dependente do tempo. Porém, quando se usa a aproximação da fronteira estacionária, em geral, desconsidera-se a dependência temporal da posição da fronteira, ou seja, considera-se  $c = c(y)$  apenas. Os trabalhos [30-36,43,44,47] procedem desta forma. Em [45] desconsidera-se a dependência temporal da posição da fronteira apenas no domínio líquido, ou seja, apenas na Eq.(3.2). Frequentemente desprezam-se também as derivadas relativas à não ortogonalidade das coordenadas  $(X,Y)$ , que são do tipo  $\partial c/\partial y$ ,  $\partial^2 c/\partial y^2$ . Isto é

feito considerando-se a frente de mudança de fase suave, com a finalidade de simplificar as equações resultantes. Em [34] existe uma estimativa de menos de 8% de erro devido a esta aproximação para os perfis convencionais de frente de mudança de fase.

Este método tem como grande vantagem a sua simplicidade. Na verdade, as métricas da transformação já levam em consideração diretamente a posição da fronteira. Desta forma, a malha não necessita ser recalculada a cada intervalo de tempo, mas apenas a posição  $c(y,t)$ , que define a posição de cada ponto da malha.

O grande defeito deste método é a sua falta de generalidade, pois a transformação parte sempre de um sistema ortogonal conhecido, cartesiano [25,33-36,44,45,47] ou cilíndrico [27,28,30-32,43], que deve representar a geometria do problema. Assim, o método da transformação de Landau não se aplica a geometrias arbitrárias, pelo menos da forma em que é conhecido.

Outro ponto importante de ser ressaltado é que neste método a malha em cada domínio possui um número fixo de pontos. À medida que a frente se desloca, ampliando um domínio e reduzindo o outro, a malha se expande no primeiro e se comprime no segundo. Isto acarreta um maior dispêndio de tempo computacional do que no caso do número total de pontos da malha para os dois domínios ser fixo, concentrando-se automaticamente nos locais mais apropriados.

### **Malha Algébrica**

Dentre as referências citadas, apenas três [38,39,46] utilizam esta forma de geração/adaptação de malha. Nelas, as equações são transformadas para coordenadas generalizadas, e a geração da malha é feita no plano físico por meio de relações analíticas com base na geometria do problema. Por exemplo, com base na geometria cartesiana apresentada na Fig. 3.1 podem-se propor as seguintes relações [38],

$$\begin{cases} y_j = \frac{1}{2} \left( \frac{j-1}{M} \right)^m & j = 1, 2, \dots, M+1 \\ x_i = \frac{c(y,t)}{2} \left( \frac{i-1}{N} \right)^n & i = 1, 2, \dots, N+1 \end{cases} \quad (3.4)$$

onde  $m$  e  $n$  são potências usadas para concentrar a malha, cujo valor adotado em [38] foi  $m=1,25$  e  $n=1,75$ . As linhas horizontais da malha são geradas até metade do domínio, onde  $j=M+1$  e  $y_j=1/2$ , e as demais são obtidas por simetria. As coordenadas  $y$  são geradas uma vez e não mudam durante a solução. Também as linhas verticais são obtidas até a metade do domínio líquido, onde  $x_i=c(y,t)/2$ , com  $i=N+1$ , e as demais resultam da simetria. O número de pontos na direção  $y$  é  $2M$  e na  $x$  é  $2N$ .

A malha deve ser recalculada em cada intervalo de tempo, ou, a rigor, apenas as posições  $x_i$ , em função da nova posição da fronteira  $c(y,t)$ . As derivadas  $x_\xi$  e  $x_\eta$  que compõem as métricas e o jacobiano, usados nas equações físicas transformadas, devem ser reavaliadas ponto a ponto a cada intervalo de tempo.

Uma série de outras relações analíticas podem ser propostas de forma que uma das coordenadas seja função da posição da frente de mudança de fase. Deve-se observar que, neste caso, apenas uma das coordenadas se adapta à frente de mudança de fase, a outra permanecendo constante.

Este método é bastante semelhante ao da transformação de Landau, e, como este, sofre de falta de generalidade. Neste caso, apesar de se utilizar uma transformação de coordenada generalizada, a metodologia usada para a geração da malha é muito pouco geral, só se aplicando a geometrias simples. Observa-se que, também neste método, o número de pontos da malha é fixo em cada domínio. Com o movimento da fronteira, a malha se expande em um deles e se contrai no outro.

### **Malha Genérica**

Um método de geração/adaptação de malha para tratar geometrias arbitrárias é obtido quando se trabalha com as equações transformadas em coordenadas generalizadas e a malha coincidente com a fronteira gerada, por exemplo, pelo método elíptico [115]. Para a malha ser adaptativa, é necessário gerá-la a cada intervalo de tempo para o novo domínio, resultante do deslocamento da frente de mudança de fase. A posição dos pontos na nova fronteira deve ser dada para o cálculo da nova malha. Os pontos são distribuídos por meio de algum método de interpolação, por exemplo, usando "spline".

Os trabalhos [29,40-42] utilizam esta metodologia de geração/adaptação da malha associada a um tratamento iterativo da dependência entre solução física e deslocamento da fronteira no tempo, apresentado na seção 3.2.1, no parágrafo Malha Dependente do Tempo. Neste caso, a malha deve ser gerada a cada iteração, atualizando os valores das métricas e das velocidades das malhas. A redistribuição dos pontos na fronteira não precisa ser feita a cada iteração, apenas é necessária de tempos em tempos para garantir uma boa uniformidade da malha.

Os trabalhos supracitados utilizam este método na modelação de apenas um domínio. Em problemas de solidificação, estuda-se o crescimento do domínio sólido [29], ao passo que nos de fusão estuda-se apenas o domínio líquido [40-42]. O número de pontos da malha é fixo e esta se expande junto com o domínio, se adaptando à solução. Na verdade, seria extremamente trabalhosa a aplicação desta metodologia aos dois domínios de solução, sendo

necessário gerar as duas malhas a cada iteração. Além disto, permanece o problema de número fixo de pontos na malha de cada um dos domínios.

### 3.3- O MÉTODO DA ENTALPIA

#### 3.3.1- Método de Tacke

O método de Tacke [75] é considerado por muitos [87,97] o melhor método de solução de problemas com mudança de fase já desenvolvido. Porém, apresenta dois problemas importantes

- 1) é um método explícito, requerendo avanços de tempo pequenos na solução, e
- 2) aparentemente não permite extensão para soluções bidimensionais, o que é um limitante muito forte.

A idéia do método será aqui apresentada devido aos excelentes resultados obtidos com sua utilização. Este método elimina o chamado “efeito escada” nas curvas de temperatura e de posição da frente, que comumente aparece nas demais soluções com método da entalpia.

O método de Tacke resolve a equação de partida em termos da entalpia total, na forma da Eq. (2.4), sem os termos convectivos:

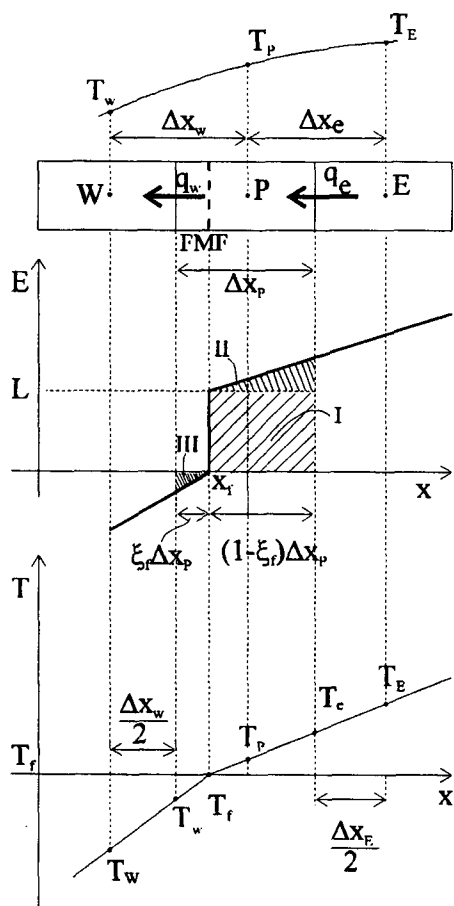
$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho E) = \frac{\partial}{\partial x} \left( k \frac{\partial T}{\partial x} \right) \quad (3.5)$$

que, discretizada explicitamente fica

$$E_P = E_P^o + \frac{\Delta t}{\rho \Delta x_P} (q_e - q_w) \quad (3.6)$$



Conforme o desenho da Fig. 3.2, representando uma solidificação da esquerda para a direita, ou uma fusão no sentido oposto, verifica-se que os fluxos de calor podem ser aproximados por:



**Fig. 3.2 - Célula em mudança de fase**

**sem mudança de fase**

$$\begin{cases} q_e = k_p \frac{T_E - T_p}{\Delta x_e} \\ q_w = k_p \frac{T_p - T_w}{\Delta x_w} \end{cases} \quad (3.7)$$

**com mudança de fase**

$$\begin{cases} q_e = k_L \frac{T_E - T_f}{x_E - x_f} \\ q_w = k_s \frac{T_f - T_w}{x_f - x_w} \end{cases} \quad (3.8)$$

Pelo gráfico da entalpia total, verifica-se que o seu valor em um volume em mudança de fase é dado por

$$\begin{aligned} \text{(I)} &= L(1 - \xi_f) \Delta x_P \\ \text{(II)} &= c_L (T_e - T_f)(1 - \xi_f) \Delta x_P / 2 \\ \text{(III)} &= c_S (T_f - T_w) \xi_f \Delta x_P / 2 \\ E_P \Delta x_P &= \text{(I)} + \text{(II)} + \text{(III)} \end{aligned} \quad (3.9)$$

A temperatura no ponto P (volume em mudança de fase) é obtida por interpolação linear, com relação aos pontos vizinhos, através das seguintes expressões:

$$T_e - T_f = \frac{(1 - \xi_f) \Delta x_P}{(1 - \xi_f) \Delta x_P + \Delta x_E / 2} (T_E - T_f) \quad (3.10)$$

$$T_P - T_f = \frac{(0,5 - \xi_f) \Delta x_P}{(1 - \xi_f) \Delta x_P + \Delta x_F / 2} (T_E - T_f) \quad (3.11)$$

$$T_f - T_w = \frac{\xi_f \Delta x_p}{\xi_f \Delta x_p + \Delta x_w / 2} (T_f - T_w) \quad (3.12)$$

Após algumas manipulações algébricas, substituindo as Eqs. (3.10-3.12) na Eq. (3.9), obtém-se uma equação ordinária de terceiro grau para  $\xi_f$ , que permite determinar a posição da frente de mudança de fase em cada instante, dada a seguir para uma malha igualmente espaçada,

$$\xi_f^3(-4 - 2St_E - 2St_W) + \xi_f^2(4 + 4f_S + 3St_E + 3St_W) + \xi_f(3 - 4f_S) - St_E - 3f_S = 0 \quad (3.13)$$

sendo

- $f_S = 1 - f = 1 - E_P / \lambda$  a fração de sólido no volume P,
- $St_E = c_L(T_E - T_f) / \lambda$  e  $St_W = c_S(T_f - T_W) / \lambda$  os números de Stefan a leste e oeste respectivamente.

Se a frente de mudança de fase passar para o próximo volume ( $\xi_f > 1$ ), corrige-se o fluxo de calor na face leste com base na fração de tempo,  $r$ , que ela permanece no volume P

$$r = (1 - \xi_f^0) / (\xi_f - \xi_f^0) \quad (3.14)$$

onde  $\xi_f^0$  é a posição relativa da frente de mudança de fase no instante de tempo anterior.

O fluxo de calor corrigido é dado por

$$q_e^c = q_e + (1 - r)(q_e^* - q_e) \quad \begin{cases} q_e = k_L(T_E - T_f) / (x_E - x_f^0) \\ q_e^* = k_S(T_f - T_P) / (x_f - x_P) \end{cases} \quad (3.15)$$

Evidentemente, a sequência de cálculos é iterativa, até se obterem valores convergidos para E, T e  $\xi_f$  em cada intervalo de tempo.

Este método possui forte significado físico. O seu maior problema é a aparente impossibilidade de aplicação em geometrias bidimensionais.

### 3.3.2- Métodos Baseados no Termo Fonte

Os métodos que utilizam a formulação em entalpia sensível necessitam de um tratamento especial para avaliação do termo fonte, conforme ressaltado na seção 2.2.2. Existem diversos destes métodos de avaliação numérica do termo fonte encontrados na literatura. Um apanhado resumido de esquemas baseados no termo-fonte é encontrado em Voller [89].

Nesta seção será descrito o método mais recente com base na formulação em entalpia sensível, por ser o que apresenta melhores resultados, tendo sido

publicado inicialmente em 1990, por Voller [89], e utilizado posteriormente em trabalhos recentes [90-92]. Este será tratado a partir daqui como "Método de Voller", apesar deste autor ter publicado diversos outros métodos.

Parte-se da equação da energia, como dada pela Eq. (2.18), reproduzida abaixo,

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho c T) + \nabla \cdot (\rho \vec{V} c T) - \nabla \cdot (k \nabla T) = -\lambda \frac{\partial}{\partial t}(\rho f) \quad (2.18)$$

discretizando-a em diferenças centrais e implicitamente no tempo, obtém-se um sistema linear representado por

$$(A_P + S_P)T_P + \sum A_{nb} T_{NB} = A_P^o T_P^o + B(f_P^o - f_P) \quad (3.16)$$

A temperatura  $T_P$  no volume em mudança de fase é feita nula, fazendo-se  $S_P$  igual a um valor grande ( $10^{15}$  por exemplo) quando  $0 < f_P < 1$ . No termo fonte, a avaliação de  $f_P$  no instante atual (nível iterativo  $n+1$ ) é feita substituindo o valor  $T_P = 0$  na equação discretizada, Eq. (3.16), resultando

$$(f_P)^{n+1} = f_P^o + \frac{-\sum A_{nb} T_{NB} + A_P^o T_P^o}{B} \quad (3.17)$$

ou, subtraindo a Eq. (3.16) em dois níveis iterativos,  $n$  e  $n+1$ , e considerando  $T_P^{n+1} = 0$ , chega-se a

$$(f_P)^{n+1} = f_P^n + \frac{(A_P + S_P)^n T_P^n}{B} \quad (3.18)$$

Com este procedimento pode-se chegar a valores fisicamente incoerentes para  $f_P$ . O método necessita que estes valores sejam corrigidos, de forma que,

- se  $f_P > 1$  faz-se  $f_P = 1$
- se  $f_P < 0$  faz-se  $f_P = 0$ .

Quando isto ocorre, deixa de existir algum volume em mudança de fase na linha, isto é, deixa de existir um volume em que  $0 < f_P < 1$ . Como consequência, em nenhum volume é feito  $T_P = 0$ , e a frente de mudança de fase "desaparece" temporariamente naquela linha do domínio discretizado.

O método de Voller é de convergência extremamente rápida. Uma vez que os coeficientes não dependem da posição da frente e a temperatura nos volumes em mudança de fase é fixa, e igual a zero, bastaria apenas uma solução do sistema linear e uma correção da fração de líquido para cada avanço de tempo. Somente quando a frente de mudança de fase está mudando de volume são necessárias mais iterações, pois diversas situações podem

ocorrer, entre elas, o caso em que a frente “desaparece”, deixando de existir algum volume em mudança de fase ( $0 < f_P < 1$ ).

A grande desvantagem deste método é o aparecimento de patamares na curva de temperatura, pois ela é anulada nos volumes em mudança de fase durante todo o tempo em que a interface permanece neste volumes. Isto provoca erros no cálculo do campo de temperatura, como mostrado no próximo capítulo, quando soluções unidimensionais serão discutidas.

### 3.3.3- Método com Posicionamento da Frente de Mudança de Fase

Alguns poucos trabalhos utilizam o método da entalpia associado a algum tipo de posicionamento da frente de mudança de fase. Pode-se dizer que a método de Tacke [75] é um deles, porém, devido a suas particularidades, foi tratado separadamente na seção 2.4.1. O método aqui descrito será chamado método de Lee & Tzong, pois foi publicado por estes autores em 1991,[87]. Este método foi também utilizado para solução de problema de mudança de fase com convecção por Raw & Lee [88] em 1991, e em problemas de fundição-molde, considerando somente condução por Tzong & Lee [93] em 1992.

A equação da energia dada em termos da entalpia sensível (2.19) é discretizada usando o esquema da função peso [116] ("*weighting function scheme*"). Com este esquema de discretização, os coeficientes podem depender da posição da frente. Também a não linearidade do termo fonte é tratada estimando a posição da frente de mudança de fase em cada instante a partir do campo de temperatura (ou entalpia sensível) calculado. Para tal, parte-se da equação de balanço de energia na interface, Eq. (2.24), unidimensional. (O procedimento será descrito aqui usando variáveis dimensionais e considerando uma solidificação da esquerda para a direita).

$$\rho_S \lambda \frac{dx_f}{dt} = \left( k \frac{dT}{dx} \right)_S - \left( k \frac{dT}{dx} \right)_L \quad (3.19)$$

Estando  $x_f$  entre  $x_i$  e  $x_{i+1}$ , isto é  $x_i < x_f < x_{i+1}$ , então  $T_i < T_f < T_{i+1}$ , e pode-se aproximar as derivadas por diferenças finitas, obtendo-se, para  $T_f = 0$ ,

$$\frac{\rho_S \lambda}{k_S} \frac{x_f - x_f^0}{\Delta t} = - \frac{T_i}{x_f - x_i} - \frac{k_L}{k_S} \frac{T_{i+1}}{x_{i+1} - x_f} \quad (3.20)$$

Após manipulações algébricas chega-se à seguinte expressão para a posição da frente,  $x_f$ ,

$$x_f = x_i - \frac{T_i \Delta x_i}{\left( \frac{k_L}{k_S} T_{i+1} - T_i \right)} - \frac{\rho_S \lambda (x_f - x_i)(x_{i+1} - x_f)}{k_S \left( \frac{k_L}{k_S} T_{i+1} - T_i \right)} \frac{x_f - x_f^0}{\Delta t} \quad (3.21)$$

O trabalho despreza o termo "transiente", fazendo a estimativa da posição da frente usando apenas

$$x_f \cong x_f^* = x_i - \frac{T_i \Delta x_i}{\left( \frac{k_L}{k_S} T_{i+1} - T_i \right)}, \quad (\text{com } T_i < 0) \quad (3.22)$$

Esta aproximação apresenta maiores erros numéricos quando a velocidade da frente é elevada e quando o número de Stefan é pequeno (isto é, energia latente maior que a sensível), tendendo sempre a subestimar o valor da posição da frente, como mostrado na figura 3.3.

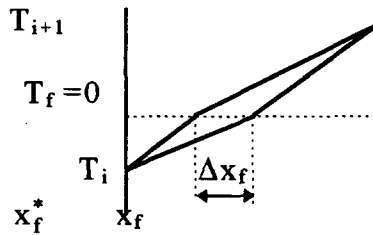


Fig. 3.3- Erro numérico na localização da interface devido à simplificação

Para o caso bidimensional, o balanço de energia na interface, conforme Ozisik [3], capítulo 10, fica

$$\rho \lambda \cos^2 \phi \frac{dx_f}{dt} = \left( k \frac{dT}{dx} \right)_L - \left( k \frac{dT}{dx} \right)_S \quad (3.23)$$

Para um volume em mudança de fase, representado na Fig. 3.4 a seguir, deve-se avaliar a fração de líquido no volume a fim de linearizar o termo fonte. Existe, então, a necessidade de determinar a posição dos pontos  $N^*$  e  $W^*$ .

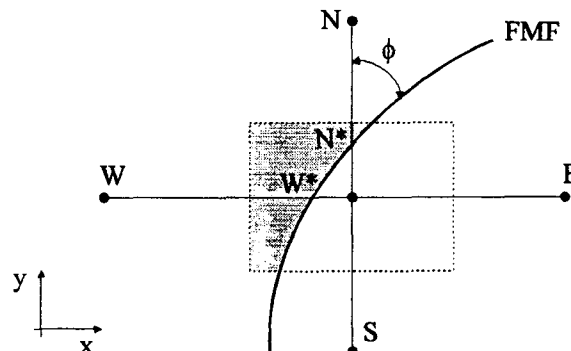


Fig. 3.4- Posição da FMF em volume em mudança de fase

Procedendo com o balanço bidimensional, Eq. (3.23), de maneira similar à descrita para o caso unidimensional, nota-se que a Eq. (3.23) se reduz a (3.22) se o termo transiente for desprezado. Conclui-se que a posição da frente de mudança de fase (ponto W\*) pode ser localizada como no caso unidimensional. A localização do ponto N\* é obtida de maneira similar.

Com a localização da interface, a fração de líquido no volume P,  $f_P$ , é calculada dividindo-o em quatro quadrantes, como representado na figura 3.5.

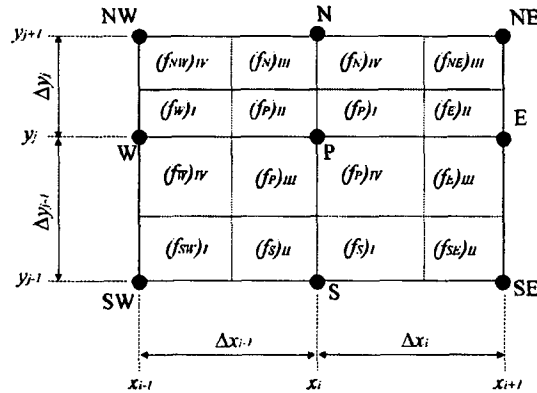


Fig. 3.5-Definição dos quadrantes do volume P

A fração de líquido do volume P é dada por

$$f_P = [(f_P)_I \Delta x_i \Delta y_j + (f_P)_{II} \Delta x_{i-1} \Delta y_j + (f_P)_{III} \Delta x_{i-1} \Delta y_{j-1} + (f_P)_{IV} \Delta x_i \Delta y_{j-1}] / (\Delta x_i \Delta y_j) \quad (3.24)$$

Maiores detalhes sobre o procedimento utilizado para o cálculo da fração de líquido,  $f_P$ , podem ser encontrados em [87].

### 3.4- COMPARAÇÃO ENTRE MÉTODOS DA TEMPERATURA E DA ENTALPIA

A comparação entre os métodos é feita analisando-se alguns aspectos importantes, enumerados a seguir.

#### 1) Previsão da posição da interface

No método da temperatura tem-se maior facilidade em prever a posição da frente de mudança de fase, devido às próprias características do método. Uma técnica para obtenção da posição da interface a partir do campo de

entalpia é descrito em [117]. Além disto, segundo Viswanath e Jaluria [99] a previsão da posição da interface em soluções bidimensionais com convecção em cavidades retangulares obtida com o método da temperatura foi mais precisa que a obtida com o método da entalpia. Em [97] a posição da interface obtida com o método da temperatura para uma malha de 20 pontos é reproduzida com o método da entalpia para uma malha de 200 pontos, uma vez que não foi usada nenhuma técnica especial de posicionamento da interface neste caso. Para uma malha menor, o método da entalpia faz aparecer “degraus” na curva de posição da interface. Já no trabalho de Lacroix & Voller [98], afirma-se que o método da entalpia pode produzir soluções tão precisas quanto o da temperatura utilizando malhas com mesma ordem de número de pontos.

## **2) Cálculo da temperatura em um ponto**

O método da temperatura prevê melhor o histórico de temperatura em um ponto. O método da entalpia cria patamares irreais nas curvas de temperatura, que só são imperceptíveis para malhas muito densas.

## **3) Utilização de diferentes propriedades térmicas nas fases**

No método da temperatura é mais direta a utilização de diferentes propriedades térmicas nas diferentes fases. No método da entalpia, por haver volumes onde as fases coexistem, esta diferenciação das propriedades térmicas não pode ser direta. Em um trabalho recente, publicado em 1993, Voller & Swaminathan [91] analisam algumas técnicas para simular propriedades diferentes nas fases, concluindo que a transformação de Kirchhoff é a que apresenta melhores resultados.

## **4) Solução de mudança de fase em uma faixa de temperatura**

Sem dúvida o método de entalpia é o mais simples para solução de problemas envolvendo mudança de fase em uma faixa de temperatura, como a que ocorre em materiais multicomponentes. Neste caso existem três regiões distintas, uma sólida, uma líquida e uma em mudança de fase, conhecida com região esponjosa, intermediária, multifásica, etc. Passam a ser duas as frentes, separando as fases. Evidentemente há um aumento na complexidade do problema, ficando extremamente difícil resolvê-lo com o método da temperatura. Poucos trabalhos são encontrados aplicando o método da temperatura na solução de mudança de fase de material binário. Em todos eles, somente uma interface é acompanhada na solução, e a região intermediária não é modelada. Como exemplo, podem-se citar os trabalhos de Beckermann & Viskanta [46] de 1988 e de Saitou & Hirata [61], de 1992.

## **5) Tratamento de geometrias complexas**

O método da entalpia tem sido historicamente utilizado em soluções com malhas fixas, ortogonais, em geometrias simples. Porém, o método em si não possui esta limitação. Em seu trabalho, publicado em 1990, Shyy & Chen mostram isto, utilizando o método da entalpia com coordenadas generalizadas e malha adaptativa. O objetivo da adaptação da malha é meramente hidrodinâmico, ou seja, é feita com a finalidade de captar melhor a camada limite nas paredes da cavidade. Isto foi feito para todos os contornos do domínio líquido, porém, não foi feito junto à interface, que também representa uma fronteira do problema.

O método da temperatura, ao contrário, tem sido historicamente utilizado com coordenadas generalizadas e malhas móveis. Porém, os métodos de adaptação da malha, como descrito na seção 3.2.1 deste capítulo, não são gerais. Os métodos até hoje utilizados para adaptação da malha dificilmente se aplicariam a geometrias complexas. Além disto, quanto mais complexa a geração/adaptação da malha, maior o tempo de computação requerido, podendo se tornar proibitivo.

## **6) Tempo de CPU**

As informações a respeito de comparações de tempos de CPU entre os dois métodos não são coincidentes. No seu trabalho, Lacroix & Voler [98] enfatizam que:

- o método da entalpia requer menor tempo de CPU para pequenos avanços de tempo,
- à medida que o avanço de tempo cresce, o tempo de CPU por avanço de tempo cresce mais para o método da entalpia,
- para grandes avanços de tempo, os dois métodos usam tempos similares de CPU,

concluindo que este parâmetro não diferencia significativamente os dois métodos.

Já no trabalho de Viswanath & Jaluria [99], publicado em 1993, os tempos de CPU para o método da temperatura são significativamente menores que para o método da entalpia. Para 19s de tempo real de fusão, o tempo de CPU para o método da temperatura é a metade do tempo requerido para o método da entalpia. Além disto, aponta para o fato de grandes avanços de tempo levarem a perda de precisão na solução pelo método da entalpia.

## **7) Simulação de mudança de volume**

Poucos trabalhos apresentam solução de problema de mudança de fase com mudança de volume devido à variação da massa específica. Devido à sua maior facilidade de trabalhar com diferentes propriedades para as diferentes fases, o método da temperatura demonstra ser o mais indicado para se



trabalhar com mudança de volume decorrente de mudança de fase. Em seu trabalho [59], publicado em 1993, Kim et al. utilizam o método da temperatura para resolver a solidificação de água entre cilindros verticais concêntricos, com expansão volumétrica, decorrente da diminuição da massa específica do material sólido.

O método da Temperatura, ou, a formulação em dois domínios tem se mostrado mais versátil que o método da entalpia em diversas situações. Segundo Viswanath e Jaluria [99] este método mostrou uma melhor previsão da posição da interface em soluções bidimensionais com convecção em cavidades retangulares, além de consumir menor tempo de CPU de computação neste caso. Usando o método da temperatura consegue-se simular a variação no volume devido a diferentes massas específicas entre fases [59]. Porém, o método da temperatura possui alguns inconvenientes principais:

- a) aplicação da condição na interface para acompanhar movimento da frente de mudança de fase. Complexidade numérica de implementação e dificuldades de predição da posição da frente de mudança de fase em casos de pequenos gradientes.
- b) a malha móvel em geometrias complexas pode requerer um gerador de malha.
- c) dificuldade de simular mudança de fase em uma faixa de temperatura, por existirem duas interfaces e três domínios.

O método da entalpia possui a seu favor a sua simplicidade, permitindo sua aplicação em soluções de problemas com mudança de fase em uma faixa de temperatura, como ocorre em materiais multicomponentes. Novos tratamentos para o termo fonte levam a redução do tempo de processamento requerido pelo método, diminuindo seus problemas de convergência. Seus maiores inconvenientes são:

- a) pouca exatidão das soluções, levando a curvas de temperatura e de posição da frente com “degraus”, ou, “patamares”.
- b) necessidade de recursos numéricos para zerar as velocidades no domínio líquido e para tratar o termo fonte convenientemente a fim de melhorar a convergência do método.
- c) dificuldades associadas à não diferenciação das duas fases, dificultando a utilização de diferentes propriedades para diferentes fases, inclusive a simulação de variação volumétrica decorrente da variação da massa específica.

## **CAPÍTULO 4**

### **A IDÉIA BÁSICA DA NOVA PROPOSTA**

#### **4.1- O EFEITO DA DISCRETIZAÇÃO**

O problema de transferência de calor com mudança de fase é não linear. Reportando-se ao capítulo 2, seção 2.2, onde se trata da conservação da energia em problemas com mudança de fase, verifica-se que a não linearidade está presente

- no termo fonte da equação da energia, pois este é função da própria solução para as formulações em entalpia, e
- no posicionamento da interface na formulação em temperatura, pois este é função da própria solução.

A fim de se estudar apenas o efeito da discretização da equação da energia, pode-se eliminar a não linearidade, em ambos os casos, utilizando-se uma solução analítica. O estudo é feito em problemas unidimensionais, cuja solução analítica é conhecida genericamente como solução de Neumann, descrita a seguir.

##### **4.1.1- A Solução de Neumann**

Neumann resolve a mudança de fase unidimensional com o material inicialmente a uma temperatura diferente da temperatura de mudança de fase. Seja a fusão de um sólido subresfriado, isto é, a uma temperatura inferior à de fusão do material; ou a solidificação de um líquido superaquecido, isto é, a uma temperatura acima da de solidificação do material. A distribuição de temperatura típica, em um dado instante, para uma fusão, é representada na figura 4.1.

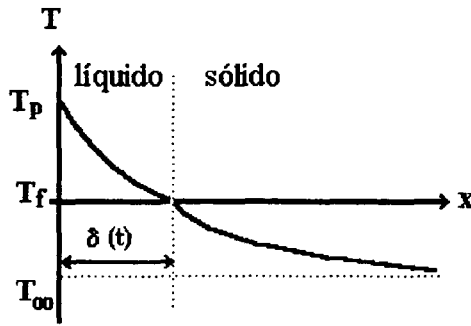


Fig. 4.1- Distribuição de Temperatura no Problema de Neumann

A equação de conservação da energia unidimensional, é aplicada ao líquido,

$$\frac{\partial T_L}{\partial t} = \alpha_L \frac{\partial^2 T_L}{\partial x^2} \quad (4.1)$$

onde  $\alpha_L$  é a difusividade térmica do líquido, com as condições de contorno

$$\begin{cases} x = 0 \Rightarrow T_L = T_p \\ x = \delta \Rightarrow T_L = T_f \end{cases} \quad (4.2)$$

Para o sólido, tem-se

$$\frac{\partial T_s}{\partial t} = \alpha_s \frac{\partial^2 T_s}{\partial x^2} \quad (4.3)$$

onde  $\alpha_s$  é a difusividade térmica do sólido. As condições de contorno são:

$$\begin{cases} x = \delta \Rightarrow T_s = T_f \\ x \rightarrow \infty \Rightarrow T_s \rightarrow T_\infty \end{cases} \quad (4.4)$$

A condição de interface deve levar em conta os fluxos de calor no líquido e no sólido, e o calor latente de fusão, ficando

$$k_s \left. \frac{\partial T_s}{\partial x} \right|_{x=\delta} - k_L \left. \frac{\partial T_L}{\partial x} \right|_{x=\delta} = \rho_s \lambda \frac{d\delta}{dt} \quad (4.5)$$

As temperaturas no líquido e no sólido, considerando  $T_f=0$ , resultam, [2,22],

$$T_L = T_p \left[ 1 - \frac{\text{erf}(x / 2\sqrt{\alpha_L t})}{\text{erf}(\Omega)} \right] \quad (4.6)$$

$$T_s = T_\infty \left[ 1 - \frac{\text{erf}(x / 2\sqrt{\alpha_s t}) - 1}{\text{erf}(\Omega\Gamma)} \right] \quad (4.7)$$

com

$$\text{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-\beta^2} d\beta \quad (4.8)$$

$$\Omega = \frac{\delta}{2\sqrt{\alpha_L t}} \quad (4.9)$$

$$e \quad \Gamma = \sqrt{\alpha_L / \alpha_s} \quad (4.10)$$

O valor de  $\Omega$  é obtido do balanço na interface, Eq. (4.5), resultando na equação transcendental a seguir

$$\frac{\text{Ste}_L \Gamma e^{-\Omega^2}}{\sqrt{\pi} \text{erf}(\Omega)} + \frac{\text{Ste}_s e^{-\Omega^2 \Gamma}}{\sqrt{\pi} [\text{erf}(\Omega\Gamma) - 1]} = \Omega\Gamma \quad (4.11)$$

onde

$$\text{Ste}_L = c_L (T_p - T_f) / \lambda \quad e \quad \text{Ste}_s = c_s (T_f - T_\infty) / \lambda \quad (4.12)$$

e a posição da frente,  $\delta$ , pode ser calculada pela Eq. (4.9).

A solução para uma solidificação é totalmente semelhante.

#### 4.1.2- Discretização da Equação

Optou-se por utilizar a equação da energia, dada em termos da temperatura como variável dependente, e termo fonte função da fração de

líquido, na forma apresentada na Eq. (2.18). Para o problema de condução unidimensional, fica

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho c T) - \frac{\partial}{\partial x} \left( k \frac{\partial T}{\partial x} \right) = -\lambda \frac{\partial}{\partial t}(\rho f) \quad (4.13)$$

A integração desta equação em um volume elementar **P**, como representado na figura 4.2, e no tempo, gera a forma discreta da equação.

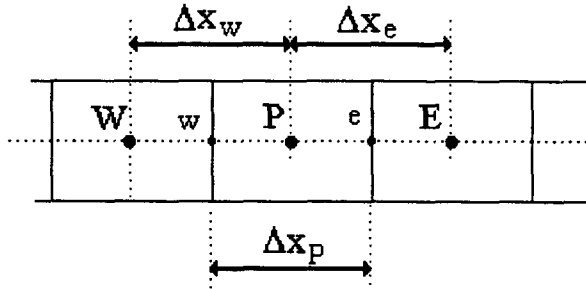


Fig. 4.2 - Volume elementar em geometria unidimensional

Então,

$$\iint_{\Delta \forall \Delta t} \frac{\partial}{\partial t}(\rho c T) dt d\forall - \iint_{\Delta \forall \Delta t} \frac{\partial}{\partial x} \left( k \frac{\partial T}{\partial x} \right) dt d\forall = - \iint_{\Delta \forall \Delta t} \lambda \frac{\partial}{\partial t}(\rho f) dt d\forall \quad (4.14)$$

e, lembrando que, no caso unidimensional  $\Delta \forall = \Delta x$ , analisa-se cada termo separadamente.

$$\iint_{\Delta \forall \Delta t} \frac{\partial}{\partial t}(\rho c T) dt d\forall = \rho c (T_P - T_P^0) \Delta x_P \quad (4.15)$$

$$\iint_{\Delta \forall \Delta t} \frac{\partial}{\partial x} \left( k \frac{\partial T}{\partial x} \right) dt d\forall = \left[ \left( k \frac{\partial T}{\partial x} \right)_e - \left( k \frac{\partial T}{\partial x} \right)_w \right] \Delta t = (q_e - q_w) \Delta t \quad (4.16)$$

$$\iint_{\Delta \forall \Delta t} \lambda \frac{\partial}{\partial t}(\rho f) dt d\forall = \lambda \rho (f_P - f_P^0) \Delta x_P \quad (4.17)$$

Substituindo-se as Eqs. (4.15-4.17) na Eq. (4.14), tem-se

$$\rho c(T_P - T_P^0) \frac{\Delta x_P}{\Delta t} - (q_e - q_w) = \rho \lambda (f_P^0 - f_P) \frac{\Delta x_P}{\Delta t} \quad (4.18)$$

Verifica-se que na Eq. (4.18) os fluxos nas faces do volume P devem ser aproximados para a total discretização da equação. (Observe-se que  $q_e$  e  $q_w$  foram definidos na Eq. (4.16) correspondendo aos fluxos de calor com o sinal contrário, para que possuam o mesmo sinal da derivada.) Comumente utiliza-se a aproximação por diferenças centrais para discretizar a derivada, por ser este um problema unicamente difusivo, independente do fato de existir uma frente de mudança de fase no volume ou não. No método de Tacke [75], apresentado na seção 3.3.1, estes fluxos de calor são tratados diferentemente, se houver mudança de fase no volume, como representado na figura 4.3, ou não. As expressões são repetidas a seguir,

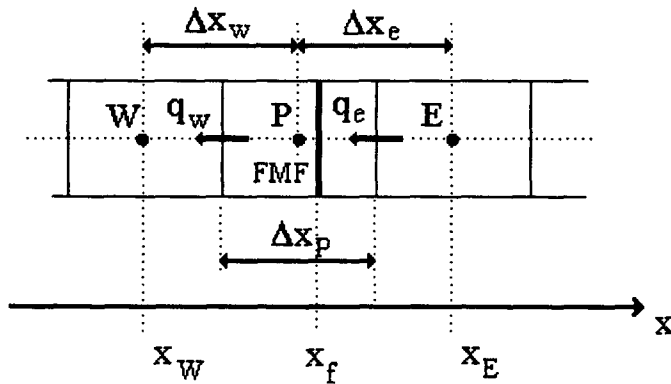


Fig. 4.3- Volume elementar unidimensional com mudança de fase

**sem mudança de fase**

$$\begin{cases} q_e = k_P \frac{T_E - T_P}{\Delta x_e} \\ q_w = k_P \frac{T_P - T_W}{\Delta x_w} \end{cases} \quad (3.7)$$

com mudança de fase

$$\begin{cases} q_e = k_+ \frac{T_E - T_f}{x_E - x_f} \\ q_w = k_- \frac{T_f - T_w}{x_f - x_w} \end{cases} \quad (3.8)$$

onde  $k_-$  é a condutividade térmica antes da frente de mudança de fase e  $k_+$  é o valor da condutividade após a frente.

Nesta seção, deseja-se mostrar o efeito da discretização destes fluxos de calor, no primeiro caso, utilizando as expressões (3.7) em todos os volumes, como é feito na grande maioria dos métodos da entalpia, e no segundo caso, utilizando-se as expressões (3.8) se houver mudança de fase no volume, como feito por Tacke [75].

A equação da energia, Eq. (4.13), discretizada, em forma genérica, pode ser escrita como,

$$A_P T_P + A_E T_E + A_W T_W = A_P^o T_P^o + B_P \quad (4.19)$$

onde os coeficientes ficam

$$A_E = -\frac{k_P}{\Delta x_e}, \quad (4.20)$$

$$A_W = -\frac{k_P}{\Delta x_w}, \quad (4.21)$$

$$A_P^o = \rho c \frac{\Delta x_P}{\Delta t}, \quad (4.22)$$

$$A_P = A_P^o - A_E - A_W \quad (4.23)$$

e o termo fonte

$$B_P = \rho \lambda (f_P^o - f_P) \frac{\Delta x_P}{\Delta t} \quad (4.24)$$

A solução da equação de energia usando estes coeficientes para todos os volumes será chamada **solução por diferenças centrais simples (d.c.s.)**.

A utilização da interface na avaliação dos fluxos nas faces do volume em mudança de fase pode ser feita de duas maneiras, gerando os métodos descritos a seguir.

### Método 0

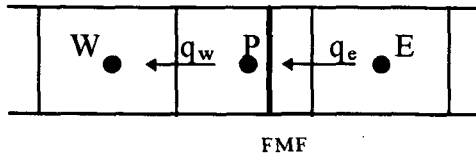


Fig. 4.4- Volume em mudança de fase e seus vizinhos

para volume em MDF

$$q_e = k_+ \frac{T_E - T_f}{x_E - x_f} \quad (4.25)$$

$$q_w = k_- \frac{T_f - T_W}{x_f - x_W} \quad (4.26)$$

para volume a leste da MDF

$$q_w = k_+ \frac{T_P - T_f}{x_P - x_f} \quad (4.27)$$

para volume a oeste da MDF

$$q_e = k_- \frac{T_f - T_P}{x_f - x_P} \quad (4.28)$$

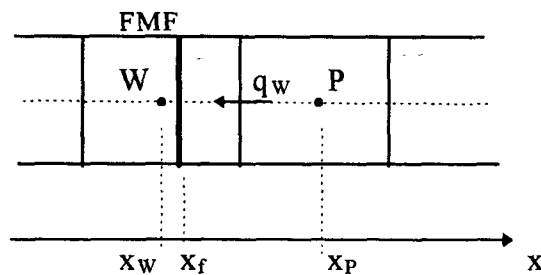
No caso de se usarem as Eqs. (4.25) e (4.26) no volume em mudança de fase, os novos coeficientes ficam

$$A_E = -\frac{k_+}{x_E - x_f}, \quad (4.29)$$

$$A_W = -\frac{k_-}{x_f - x_W}, \quad (4.30)$$

$$A_P = A_P^o \quad (4.31)$$

Os mesmos fluxos de calor que saem/entram no volume P devem entrar/sair dos seus volumes vizinhos.



$$q_w = k_+ \frac{T_P - T_f}{x_P - x_f}$$

Fig. 4.5- Volume elementar a leste da frente de mudança de fase



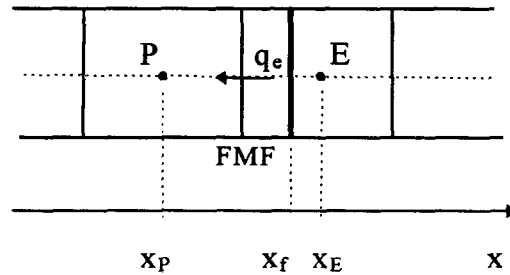
Então, para o volume a leste do volume em mudança de fase, conforme representado na Fig. 4.5, os coeficientes  $A_W$  e  $A_P$  devem levar isto em conta, ficando

$$A_W = 0 \quad (4.32)$$

$$A_P = A_P^0 + \frac{k_+}{x_P - x_f} - A_E \quad (4.33)$$

O coeficiente  $A_E$  permanece o mesmo, dado na Eq. (4.20).

Para o volume a oeste da frente de mudança de fase, Fig. 4.6, procedendo de maneira similar, tem-se



$$q_e = k_- \frac{T_f - T_P}{x_f - x_P}$$

Fig. 4.6- Volume elementar a oeste da frente de mudança de fase

$$A_E = 0 \quad (4.34)$$

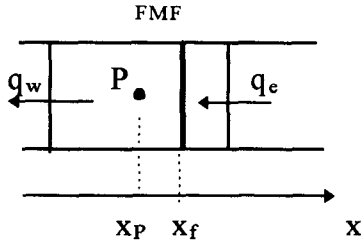
$$A_P = A_P^0 + \frac{k_-}{x_f - x_P} - A_W \quad (4.35)$$

Com o coeficiente  $A_W$  permanecendo o mesmo, dado na Eq. (4.21).

### Método 1

O fluxo de calor nas faces é obtido por meio da diferença de temperaturas entre pontos mais próximos. Os fluxos nas faces, então, ficam

$$x_f/x_P > 1$$

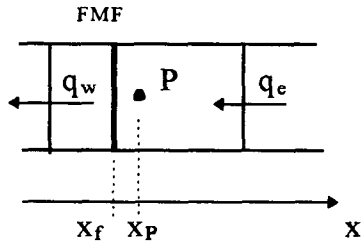


para volume em MDF

$$x_f/x_P > 1 \quad \left| \quad x_f/x_P < 1 \right. \quad \left. \begin{aligned} q_e &= k_+ \frac{T_E - T_f}{x_E - x_f} \\ q_w &= k_- \frac{T_P - T_W}{x_P - x_W} \end{aligned} \right. \quad \left. \begin{aligned} q_e &= k_+ \frac{T_E - T_P}{x_E - x_P} \\ q_w &= k_- \frac{T_f - T_W}{x_f - x_W} \end{aligned} \right. \quad (4.36)$$

$$x_f/x_P > 1 \quad \left| \quad x_f/x_P < 1 \right. \quad \left. \begin{aligned} q_e &= k_+ \frac{T_E - T_f}{x_E - x_f} \\ q_w &= k_- \frac{T_P - T_W}{x_P - x_W} \end{aligned} \right. \quad \left. \begin{aligned} q_e &= k_+ \frac{T_E - T_P}{x_E - x_P} \\ q_w &= k_- \frac{T_f - T_W}{x_f - x_W} \end{aligned} \right. \quad (4.37)$$

$$x_f/x_P < 1$$



para volume a leste da MDF

$$x_f/x_P > 1 \quad \left| \quad x_f/x_P < 1 \right. \quad \left. \begin{aligned} q_w &= k_+ \frac{T_P - T_f}{x_P - x_f} \\ q_e &= k_- \frac{T_P - T_W}{x_P - x_W} \end{aligned} \right. \quad \left. \begin{aligned} q_w &= k_+ \frac{T_P - T_f}{x_P - x_f} \\ q_e &= k_- \frac{T_P - T_W}{x_P - x_W} \end{aligned} \right. \quad (4.38)$$

para volume a oeste da MDF

$$x_f/x_P > 1 \quad \left| \quad x_f/x_P < 1 \right. \quad \left. \begin{aligned} q_e &= k_- \frac{T_E - T_P}{x_E - x_P} \\ q_w &= k_+ \frac{T_f - T_P}{x_f - x_P} \end{aligned} \right. \quad \left. \begin{aligned} q_e &= k_- \frac{T_E - T_P}{x_E - x_P} \\ q_w &= k_+ \frac{T_f - T_P}{x_f - x_P} \end{aligned} \right. \quad (4.39)$$

Fig. 4.7- Posição da FMF no volume em mudança de fase

Definindo o parâmetro IR como sendo o inteiro correspondente à relação  $x_f/x_P$ , resulta

$$IR = x_f/x_P = \begin{cases} 0 & \text{se } x_f/x_P < 1 \\ 1 & \text{se } x_f/x_P \geq 1 \end{cases} \quad (4.40)$$

Os coeficientes para o volume em mudança de fase ficam

$$A_E = -(1-IR) \frac{k_+}{\Delta x_e} - IR \frac{k_+}{x_E - x_f}, \quad (4.41)$$

$$A_W = -IR \frac{k_-}{\Delta x_w} - (1-IR) \frac{k_-}{x_f - x_W}, \quad (4.42)$$

$$A_P = A_P^0 - (1-IR) A_E - IR A_W \quad (4.43)$$

Para o volume a leste do volume em mudança de fase, os coeficientes resultam

$$A_W = -(1 - IR) \frac{k_+}{\Delta x_w}, \quad (4.44)$$

$$A_P = A_P^0 + IR \frac{k_+}{x_P - x_f} - A_E - A_W \quad (4.45)$$

Com o coeficiente  $A_E$  permanecendo o mesmo, dado na Eq. (4.20).

Para o volume a oeste do volume em mudança de fase, têm-se os seguintes coeficientes

$$A_E = -IR \frac{k_-}{\Delta x_e}, \quad (4.46)$$

$$A_P = A_P^0 + (1 - IR) \frac{k_-}{x_f - x_P} - A_E - A_W \quad (4.47)$$

Com o coeficiente  $A_W$  permanecendo o mesmo, dado na Eq. (4.21).

Para a utilização destes métodos de discretização, é necessário conhecer a posição de interface em cada instante. Os coeficientes são calculados pelas expressões (4.20) a (4.23) para todos os volumes, a menos do volume em mudança de fase e nos seus vizinhos onde se utilizam as expressões apresentadas acima para os dois métodos. É importante observar que uma nova não linearidade surge, pois, para esta discretização, os coeficientes da equação ficam dependentes da posição da interface, que é função da solução do problema. A discretização em diferenças centrais simples não apresenta este inconveniente.

#### 4.1.3 - Linearização do Problema

Analizando a equação de conservação da energia que rege o problema de mudança de fase unidimensional, dada em (4.13), verifica-se que a única não linearidade se encontra no termo-fonte, mais precisamente na avaliação da fração de líquido,  $f_p$ , do volume em mudança de fase. Para eliminar esta não linearidade do problema, calcula-se o valor exato da fração de líquido, utilizando a solução analítica de Neumann.

De acordo com a figura 4.8, a fração de líquido para um volume em mudança de fase, em uma solidificação da esquerda para a direita, é dado por

$$f_p = \frac{x_e - x_f}{\Delta x_p} \quad (4.48)$$

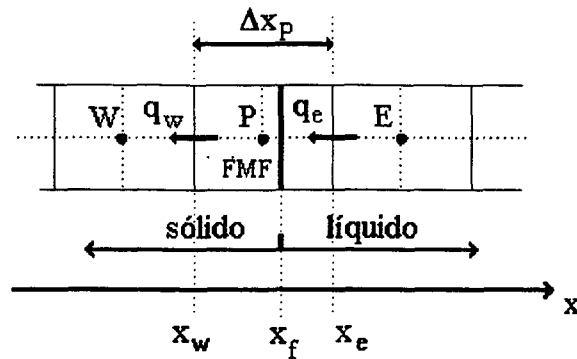


Fig. 4.8- Volume elementar com mudança de fase

Da solução de Neumann obtém-se o valor de  $x_f$ , fazendo  $x_f = \delta$ , calculado usando a Eq. (4.9).

A discretização dos fluxos de calor com relação à posição da frente gera coeficientes que são função da posição da interface  $x_f$ , como visto anteriormente. O valor exato da solução analítica foi usado para linearização também desta não linearidade.

#### 4.1.4 - Comparação das Soluções Numéricas e Analítica

O objetivo de verificar o comportamento da discretização da equação da energia pode ser atingido por meio da solução de problemas unidimensionais simples, para os quais a solução analítica é conhecida. Na verdade, a solução de Neumann considera o corpo infinito. Esta condição não é reproduzida na solução numérica, que considera temperatura prescrita no final do corpo. Portanto, estas soluções somente são comparáveis para comprimentos iniciais, isto é, até a frente de mudança de fase atingir cerca de 30% do comprimento do corpo finito.

Dois problemas teste foram utilizados; para  $Ste=0,5$  e para  $Ste=2,0$ , a fim de se verificar a influência do número de Stefan na aproximação. Em ambos ocorre uma solidificação de um material inicialmente a uma temperatura de  $2^\circ\text{C}$  cuja temperatura na parede a oeste fica  $-10^\circ\text{C}$ . A variação do valor do  $Ste$  do problema é obtida variando-se o valor do calor latente,  $\lambda$ , do material, uma vez que  $Ste=c\Delta T/\lambda$ .

Foram comparados os métodos 0 e 1, e a discretização em diferenças centrais simples (d.c.s.). As curvas apresentadas a seguir correspondem ao histórico de temperatura com o tempo para o ponto a 17,5% do comprimento do corpo, ou seja na posição adimensional  $x=0,175$ . O tempo adimensional é o

número de Fourier, definido como  $Fo = \alpha t / L^2$ , onde  $L$  é o comprimento característico do problema.

As curvas apresentadas na figura 4.9, comparam os método 1 e a discretização em diferenças centrais simples (d.c.s.) com a solução analítica. Verifica-se que com o método 1 consegue-se prever melhor a temperatura que com a aproximação das diferenças centrais simples. Verifica-se que as maiores oscilações de temperatura ocorrem quando a interface muda de volume, ficando fácil notar que o ponto analisado se encontra no terceiro volume da malha discreta. É também importante ressaltar que as maiores oscilações ocorrem para menor valor de  $Ste$ , ou seja, quando a mudança de fase é mais importante no problema térmico.

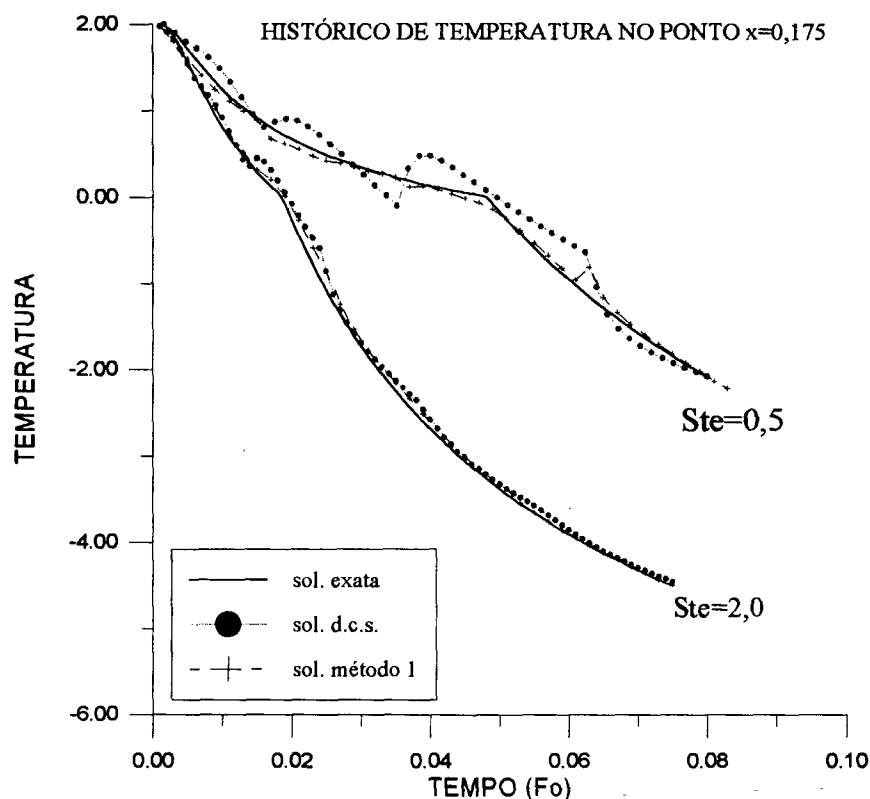


Fig. 4.9- Comparação entre o método 1 e d.c.s.

A figura 4.10 apresenta a comparação entre o método 0 e a discretização em diferenças centrais simples (d.c.s.). Verifica-se que o método 0 não causa oscilações no histórico de temperatura, mas, possui uma grande inabilidade de prever a temperatura no volume em mudança de fase.

Conclui-se que o método 1 é o que melhor aproxima a equação da energia, uma vez que, dada a posição correta da frente de mudança de fase, a melhor previsão da temperatura é obtida por este método de aproximação.

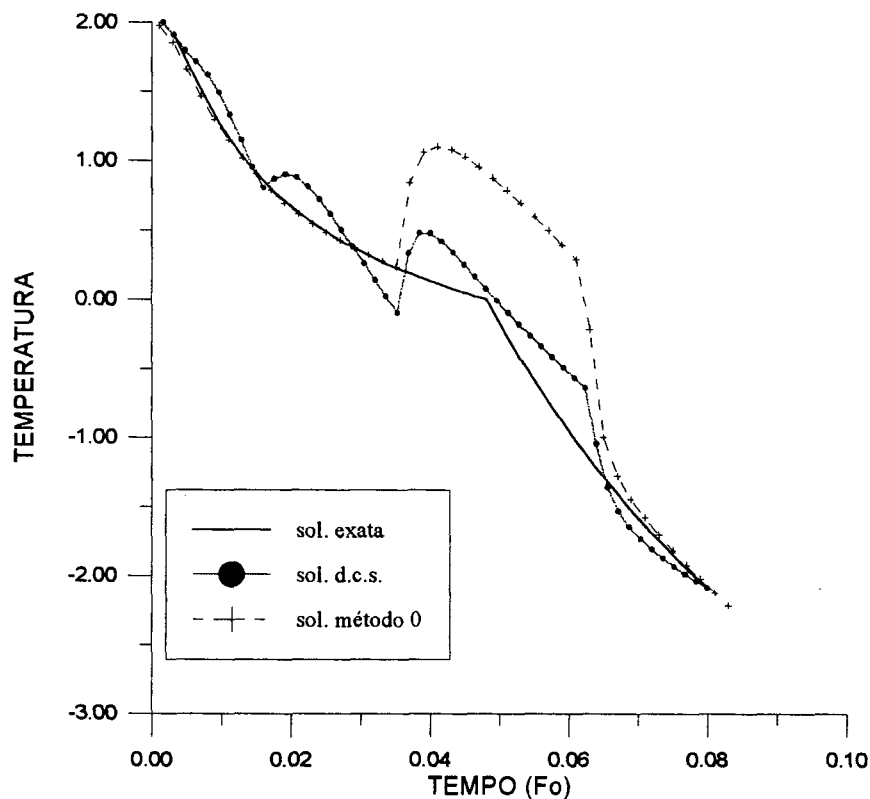


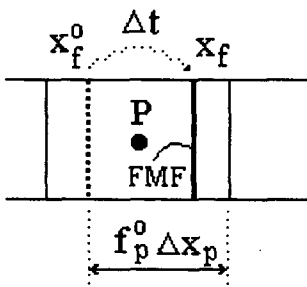
Fig. 4.10- Comparação entre o método 0 e d.c.s.

## 4.2 - O EFEITO DA INTERFACE MUDANDO DE VOLUME

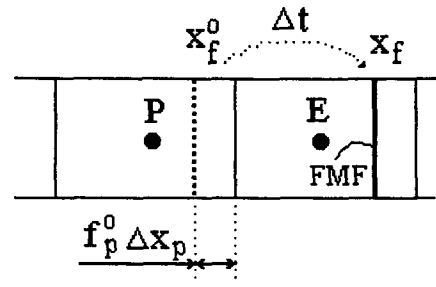
Durante a solução numérica do problema de mudança de fase, uma situação especialmente complicada ocorre quando da passagem da interface de um volume discreto da malha para o próximo. Isto fica claro analisando-se a solução numérica apresentada na seção anterior. Mesmo com a linearização da equação, no caso da discretização convencional, fica evidente a passagem da interface pelos volumes da malha, devido ao aparecimento de “degraus” na curva da temperatura. Com base nesta dificuldade, resolveu-se obter uma melhor aproximação para os fluxos nas faces do volume em mudança de fase, para levar em conta a passagem da interface para o volume vizinho. Estudou-se uma correção dos fluxos, como a proposta por Tacke [75], conforme apresentado na seção 3.3.1.

#### 4.2.1- Correção do Fluxo de Calor

Define-se inicialmente, semelhantemente ao feito por Tacke [75], como visto na seção 3.3.1, um parâmetro,  $r$ , que indica se a frente mudou de volume durante o avanço de tempo atual. Além disto, seu valor corresponde à fração do avanço de tempo em que a frente permanece no volume anterior. De acordo com os esquemas da figura 4.11, a seguir, tem-se



a) FMF não muda de volume



b) FMF muda de volume

Fig. 4.11 - Movimento da interface em um avanço de tempo

$$r = \frac{f_p^0 \Delta x_p}{x_f - x_f^0} \begin{cases} r \geq 1 \Rightarrow \text{a frente permanece no mesmo volume} \\ r < 1 \Rightarrow \text{a frente passou para o próximo volume} \end{cases} \quad (4.49)$$

onde  $f_p^0$  é a fração de líquido no volume  $P$  no tempo anterior,  $x_f^0$  é a posição da interface no tempo anterior e  $x_f$  é a posição atual da interface.

Dois métodos de correção serão testados, baseados nos métodos 0 e 1 apresentados na seção 4.1.2. O método 2 será o método 0 com os fluxos corrigidos, e o método 3 será o método 1 com a correção dos fluxos devido à mudança de volume. Os fluxos de calor para cada caso são dados a seguir.

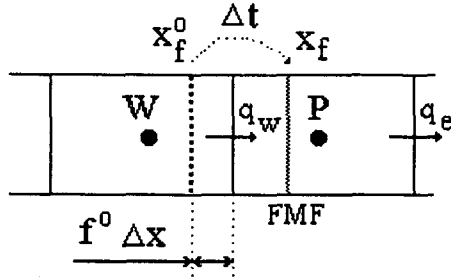
**Método 2**

Fig. 4.12- FMF mudando de volume em um avanço de tempo ( $r < 1$ )

**para volume em MDF atual**

$$q_e = r k_+ \frac{T_E - T_P}{x_E - x_P} + (1-r) k_+ \frac{T_E - T_f}{x_E - x_f} \quad (4.50)$$

$$q_w = r k_+ \frac{T_P - T_f}{x_P - x_f^0} + (1-r) k_- \frac{T_f - T_W}{x_f - x_W} \quad (4.51)$$

**para volume a leste da MDF**

$$q_w = r k_+ \frac{T_P - T_W}{x_P - x_W} + (1-r) k_+ \frac{T_P - T_f}{x_P - x_f} \quad (4.52)$$

**para volume a oeste da MDF**

$$q_e = r k_+ \frac{T_E - T_f}{x_E - x_f^0} + (1-r) k_- \frac{T_f - T_P}{x_f - x_P} \quad (4.53)$$

Quando a frente de mudança de fase não muda de volume, os fluxos permanecem como dados para o método 0. Generalizando, os fluxos ficam

**para volume em MDF atual**

$$q_e = \lambda_1 k_+ \frac{T_E - T_P}{x_E - x_P} + \lambda_2 k_+ \frac{T_E - T_f}{x_E - x_f} \quad (4.54)$$

$$q_w = \lambda_1 k_+ \frac{T_P - T_f}{x_P - x_f^0} + \lambda_2 k_- \frac{T_f - T_W}{x_f - x_W} \quad (4.55)$$

**para volume a leste da MDF**

$$q_w = \lambda_1 k_+ \frac{T_P - T_W}{x_P - x_W} + \lambda_2 k_+ \frac{T_P - T_f}{x_P - x_f} \quad (4.56)$$

**para volume a oeste da MDF**

$$q_e = \lambda_1 k_+ \frac{T_E - T_f}{x_E - x_f^0} + \lambda_2 k_- \frac{T_f - T_P}{x_f - x_P} \quad (4.57)$$

com

$$\lambda_1 = \begin{cases} 0 & \text{se } r \geq 1 \\ r & \text{se } r < 1 \end{cases} \quad (4.58)$$



$$\lambda_2 = \begin{cases} 1 & \text{se } r \geq 1 \\ 1-r & \text{se } r < 1 \end{cases} \quad (4.59)$$

### Método 3

$$x_f/x_P > 1$$

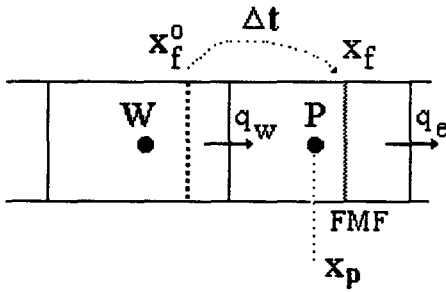


Fig. 4.13- FMF mudando de volume com  $x_f/x_P > 1$  ( $r < 1$ )

para volume em MDF atual

$$x_f/x_P > 1$$

$$q_e = r k_+ \frac{T_E - T_P}{x_E - x_P} + (1-r) k_+ \frac{T_E - T_f}{x_E - x_f} \quad (4.60)$$

$$q_w = r k_+ \frac{T_P - T_f}{x_P - x_f^0} + (1-r) k_- \frac{T_P - T_W}{x_P - x_W} \quad (4.61)$$

para volume a leste da MDF

$$x_f/x_P > 1$$

$$q_w = r k_+ \frac{T_P - T_W}{x_P - x_W} + (1-r) k_+ \frac{T_P - T_f}{x_P - x_f} \quad (4.62)$$

para volume a oeste da MDF

$$x_f/x_P > 1$$

$$q_e = r k_+ \frac{T_E - T_f}{x_E - x_f^0} + (1-r) k_- \frac{T_E - T_P}{x_E - x_P} \quad (4.63)$$

para volume em MDF atual

$$x_f/x_P < 1$$

$$q_e = r k_+ \frac{T_E - T_P}{x_E - x_P} + (1-r) k_+ \frac{T_E - T_P}{x_E - x_P} \quad (4.64)$$

$$q_w = r k_+ \frac{T_P - T_f}{x_P - x_f^0} + (1-r) k_- \frac{T_f - T_W}{x_f - x_W} \quad (4.65)$$

para volume a leste da MDF

$$x_f/x_P < 1$$

$$q_w = r k_+ \frac{T_P - T_W}{x_P - x_W} + (1-r) k_+ \frac{T_P - T_W}{x_P - x_W} \quad (4.66)$$

para volume a oeste da MDF

$$x_f/x_P < 1$$

$$q_e = r k_+ \frac{T_E - T_f}{x_E - x_f^0} + (1-r) k_- \frac{T_f - T_P}{x_f - x_P} \quad (4.67)$$

$$x_f/x_P < 1$$

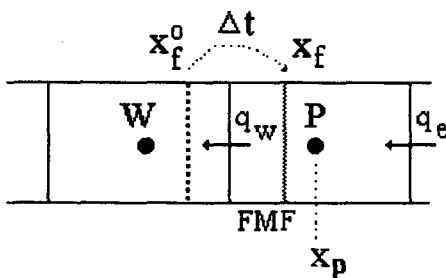


Fig. 4.14- FMF mudando de volume com  $x_f/x_P < 1$  ( $r < 1$ )

Quando a interface não muda de volume num avanço de tempo, os fluxos de calor são os mesmos do método 1. Generalizando, os fluxos de calor nas faces dos volumes em mudança de fase e seus vizinhos, são:

**para volume em MDF atual**

$$q_e = \lambda_1 k_+ \frac{T_E - T_P}{x_E - x_P} + \lambda_2 k_+ \frac{T_E - T_P}{x_E - x_P} + \lambda_3 k_+ \frac{T_E - T_f}{x_E - x_f} \quad (4.68)$$

$$q_w = \lambda_1 k_+ \frac{T_P - T_f}{x_P - x_f^o} + \lambda_2 k_- \frac{T_f - T_W}{x_f - x_W} + \lambda_3 k_- \frac{T_P - T_W}{x_P - x_W} \quad (4.69)$$

**para volume a leste da MDF**

$$q_w = \lambda_1 k_+ \frac{T_P - T_W}{x_P - x_W} + \lambda_2 k_+ \frac{T_P - T_W}{x_P - x_W} + \lambda_3 k_+ \frac{T_P - T_f}{x_P - x_f} \quad (4.70)$$

**para volume a oeste da MDF**

$$q_e = \lambda_1 k_+ \frac{T_E - T_f}{x_E - x_f^o} + \lambda_2 k_- \frac{T_f - T_P}{x_f - x_P} + \lambda_3 k_- \frac{T_E - T_P}{x_E - x_P} \quad (4.71)$$

com

$$\lambda_1 = \begin{cases} 0 & \text{se } r \geq 1 \\ r & \text{se } r < 1 \end{cases} \quad (4.72)$$

$$\lambda_2 = \begin{cases} 1 & \text{se } r \geq 1 \text{ e } x_f / x_P < 1 \\ 1 - r & \text{se } r < 1 \text{ e } x_f / x_P < 1 \\ 0 & \text{se } x_f / x_P \geq 1 \end{cases} \quad (4.73)$$

$$\lambda_3 = 1 - \lambda_1 - \lambda_2 \quad (4.74)$$

Estes parâmetros são facilmente programados usando funções internas, sem a necessidade de testes que gastam maior tempo de computação.

#### 4.2.2- Comparação das Soluções Numéricas e Analítica

O efeito da correção dos fluxos de calor nas faces quando a frente de mudança de fase muda de volume é estudado pela comparação com os métodos sem a correção. Os problemas-teste utilizados são os mesmos da seção 4.1.4, utilizando-se novamente a solução analítica para linearizar a solução.

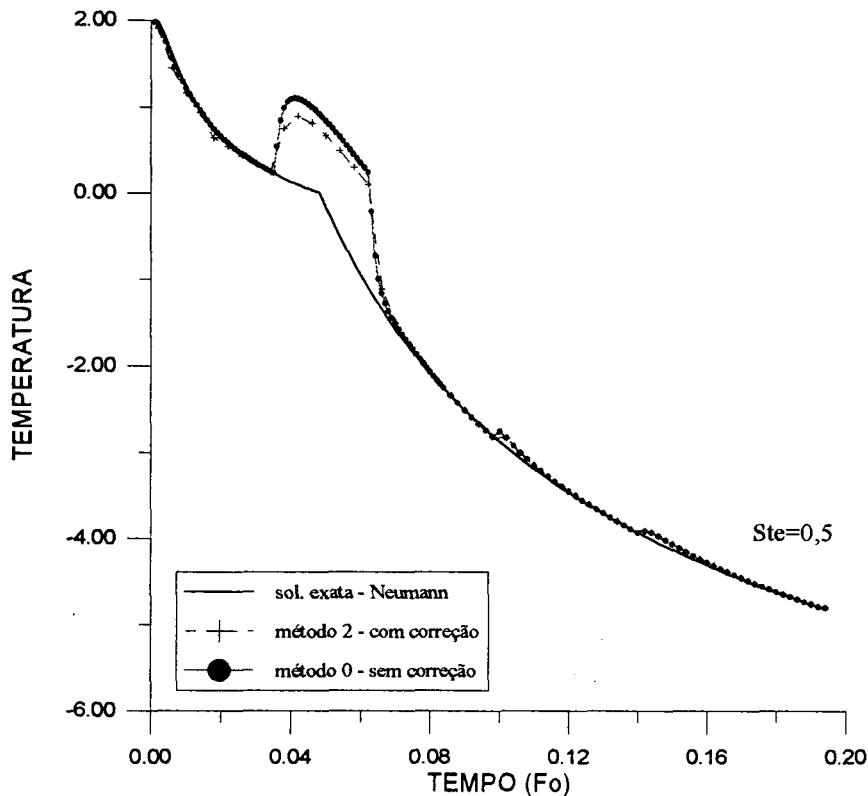


Fig. 4.15- Comparação entre os métodos 0 e 2

A figura 4.15 apresenta a comparação entre o método 0, sem correção dos fluxos de calor, e o método 2, com correção dos fluxos de calor decorrente da passagem da interface para próximo volume. Verifica-se que houve uma pequena melhora na previsão da temperatura no volume em mudança de fase.

A comparação entre os métodos 1 e 3 é apresentada na figura 4.16, onde também se verifica uma melhora quase imperceptível na previsão da temperatura.

Conclui-se que não houve melhora significativa na aproximação da equação da energia com a utilização da correção para a interface mudando de volume. Esta correção introduz maior complexidade no cálculo dos coeficientes da equação discretizada e, portanto, não se justifica pelos resultados obtidos.

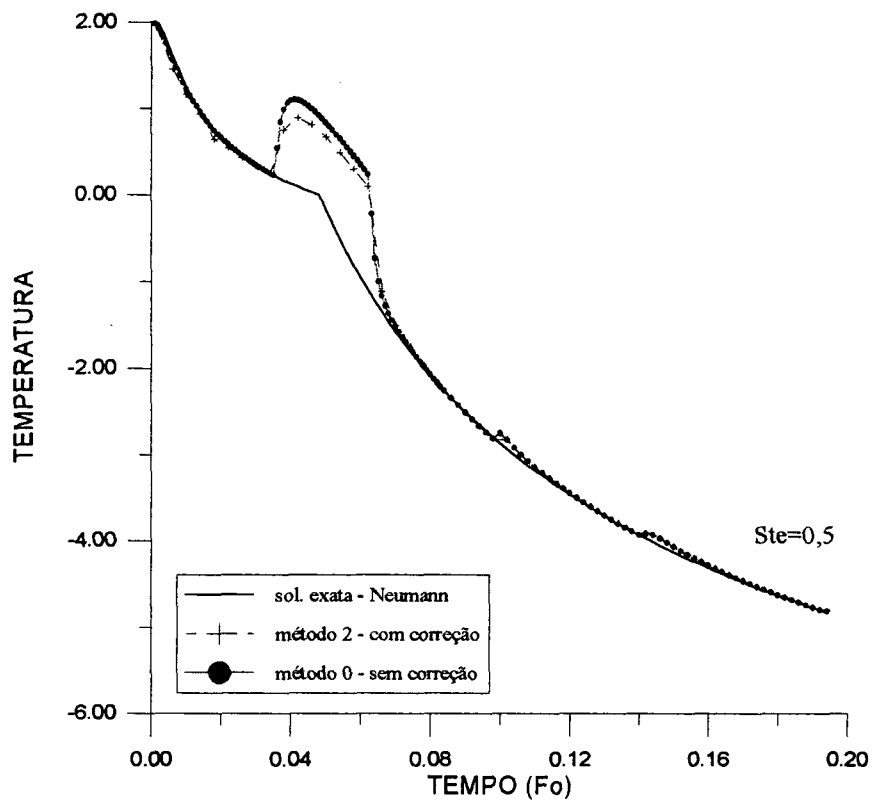


Fig. 4.16- Comparação Entre Métodos 1 e 3

### 4.3 - O NOVO MÉTODO

#### 4.3.1- Novo Tratamento da Frente de Mudança de Fase

O objetivo da nova proposta de método é um tratamento especial da solução junto à frente de mudança de fase. O novo método fornece um nível maior de detalhamento junto à interface, permitindo uma solução mais precisa, tanto do campo de temperatura, quanto da posição da frente de mudança de fase.

Os fluxos de calor nas faces do volume em mudança de fase são discretizados levando em consideração a posição da frente de mudança de fase.

A temperatura no volume em mudança de fase, diferentemente do que é feito no método de volumes finitos, não representa o valor integrado no volume. Toma-se para este volume o valor da temperatura no ponto (centro do volume) por meio de interpolação linear com relação aos vizinhos, como feito

por Tacke [75], apresentado na seção 3.3.1. Assim, o cálculo de  $T_P$  para o volume em mudança de fase, usando  $T_f=0$  como referência, é dado por

$$T_P = \begin{cases} \frac{x_P - x_f}{x_E - x_f} T_E & \text{se } x_f / x_P < 1 \\ \frac{x_P - x_f}{x_W - x_f} T_W & \text{se } x_f / x_P > 1 \end{cases} \quad (4.75)$$

Desta forma, a equação de conservação da energia não é resolvida no volume de mudança de fase para obter o valor da temperatura neste ponto. Neste caso, ela é usada na forma de um balanço para calcular a fração de líquido no volume e, conseqüentemente, a posição da frente de mudança de fase, conforme apresentado na próxima seção.

#### 4.3.2- O Balanço no Volume em Mudança de fase

A equação da energia integrada em um volume elementar e no tempo, como mostrado na seção 4.1.3, representa um balanço de energia no volume elementar, do tipo

$$\text{VAR} + \text{FLUE} + \text{FLUW} = \text{FONTE} \quad (4.76)$$

onde

$$\text{VAR} = \rho c (T_P - T_P^o) \frac{\Delta x_P}{\Delta t} \quad - \text{ é a variação de energia sensível no volume no intervalo de tempo } \Delta t.$$

$$\text{FLUE} = -q_e = - \left[ k \frac{\partial T}{\partial x} \right]_e \quad - \text{ é o fluxo de calor na face leste do volume.}$$

$$\text{FLUW} = q_w = \left[ k \frac{\partial T}{\partial x} \right]_w \quad - \text{ é o fluxo de calor na face oeste do volume.}$$

$$\text{FONTE} = \rho L (f_P^o - f_P) \frac{\Delta x_P}{\Delta t} \quad - \text{ é a variação de energia latente no volume no intervalo de tempo } \Delta t.$$

Foram pesquisadas basicamente quatro novas maneiras de aproximação dos fluxos de calor nas faces do volume em mudança de fase, gerando diferentes grupos de coeficientes para os volumes vizinhos e diferentes expressões para o cálculo de FLUE e FLUW. As duas primeiras foram apresentadas na seção 4.1.2, inclusive com a listagem dos coeficientes resultantes, através dos métodos 0 e 1, que serão chamados de métodos sem correção dos fluxos. As outras duas maneiras levam em conta o movimento da frente na malha discreta, e tentam corrigir os erros de discretização quando a interface muda de volume. Elas são apresentadas na seção 4.2.1, através dos métodos 2 e 3 com correção dos fluxos.

Como ressaltado na seção anterior, no método proposto a equação de conservação da energia não é resolvida para o volume em mudança de fase para obter a temperatura integrada no volume. Ao invés disto, a temperatura no ponto é obtida por interpolação linear, com relação aos volumes vizinhos e a equação da energia é utilizada para calcular a fração de líquido  $f_p$ , no volume em mudança de fase. Com base neste valor encontra-se a posição da frente de mudança de fase, atualizam-se os coeficientes, que no caso da discretização proposta são dependentes da posição da frente e calcula-se o novo campo de temperaturas. Somente os coeficientes dos volumes vizinhos ao de mudança de fase variam e, por isso, a convergência é rápida.

O cálculo da variação da energia sensível no volume em mudança de fase não deve ser feito como em (4.76), pois a temperatura no centro do volume não mais representa a temperatura média no volume e sim um valor puntual. Então, o cálculo da variação da energia sensível deve levar isto em conta, calculando-se o valor médio da temperatura no volume. A figura 4.17 mostra um volume em mudança de fase, durante um avanço de tempo.

Com base na figura 4.17, pode-se dizer que a energia sensível, usando a referência  $T_f=0$ , em um volume em mudança de fase pode ser aproximada como

$$ES = \rho c [\bar{T}_w (x_f - x_w) + \bar{T}_e (x_e - x_f)], \quad (4.77)$$

onde

$$\begin{aligned} \bar{T}_w &= \frac{T_f + T_w}{2} = \frac{T_w}{2}, \\ \bar{T}_e &= \frac{T_f + T_e}{2} = \frac{T_e}{2}, \end{aligned} \quad (4.78)$$

e

$$T_w = \frac{x_f - x_w}{x_f - x_w} T_w, \quad (4.79)$$

$$T_e = \frac{x_e - x_f}{x_e - x_f} T_e. \quad (4.80)$$

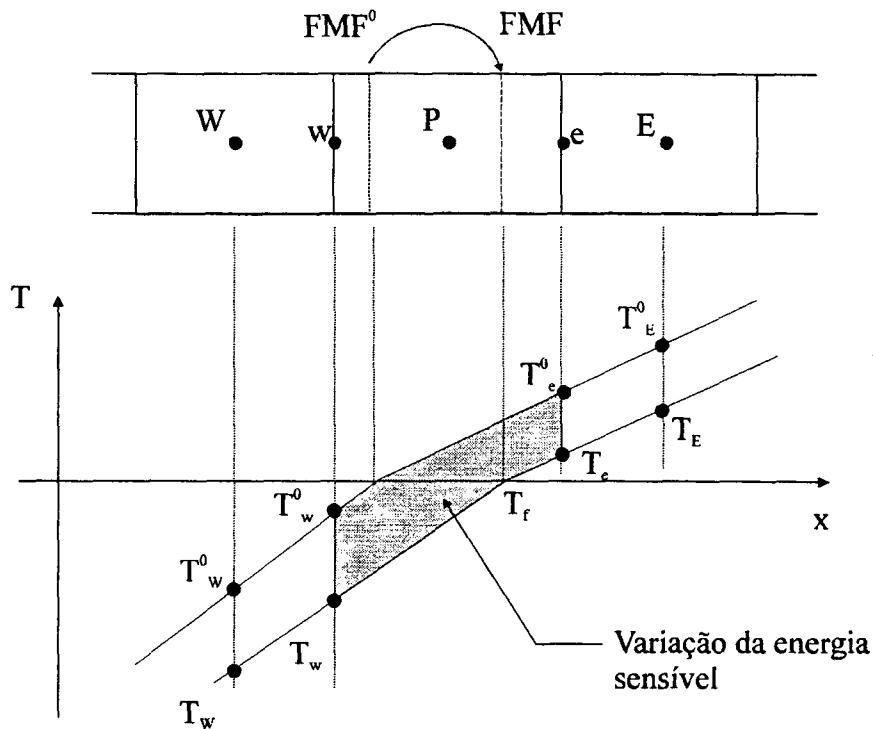


Fig. 4.17- Variação da energia sensível em um volume em mudança de fase

A variação da energia sensível no volume em mudança de fase, VAR, usado no balanço para prever a posição da interface, é calculada como

$$\text{VAR} = \frac{(ES - ES^0)}{\Delta t} \quad (4.81)$$

O valor  $ES^0$  é armazenado do tempo anterior, no caso da frente de mudança de fase permanecer no mesmo volume, caso contrário, a energia sensível existente em um volume que não estava em mudança de fase vale

$$ES^0 = \rho c T_P^0 \Delta x_P \quad (4.82)$$

Com isto, pode-se efetuar o balanço de energia no volume em mudança de fase, satisfazendo a equação de conservação de energia, a fim de se obter a nova posição da interface a partir da nova fração de líquido calculada no balanço.

O método de Voller [89], apresentado na seção 3.3.2, também utiliza a equação da energia para calcular a fração de líquido, uma vez que a temperatura no volume em mudança de fase não é calculada, sendo fixada em zero, através de um artifício numérico. Como neste método os coeficientes não são função da posição da interface, pois a discretização utilizada para os fluxos de calor nas faces não leva em consideração a presença da frente de mudança de fase, não há necessidade de atualização dos coeficientes. Porém, no caso de uma solidificação, quando a fração de líquido no volume torna-se negativa, indica que todo o volume encontra-se no estado sólido e a frente deveria passar para o próximo volume. Comumente isto não ocorre. O método faz artificialmente a fração de líquido no volume igual a zero e, em geral, no volume seguinte a fração de líquido permanece igual a um (ou maior que um, sendo feito igual a um pelo método). Neste caso, nenhum volume encontra-se em mudança de fase, para o qual a fração de líquido estaria entre zero e um. A interface se perde e o nível de temperatura zero deixa de ser imposto em algum volume. Por isso, toda vez que a interface sai de um volume, o método apresenta maior dificuldade de convergência, necessitando um número maior de iterações.

Na seção 4.3.4, resultados comparando a performance dos métodos são apresentados. A solução exata de Neumann é apresentada em todos os casos, permitindo a comparação com as soluções numéricas.

#### 4.3.3- Primeira Avaliação da Fração de Líquido

Observando a equação de conservação da energia discretizada, verifica-se que no termo fonte existe a necessidade de se conhecer a fração de líquido,  $f_p$ , no instante atual. Como esta variável é função da solução do problema, isto configura uma não linearidade.

As não linearidades são tratadas numericamente por meio de métodos iterativos. Porém, de um modo geral, quanto mais próxima for a primeira avaliação do valor final, mais rápida será a convergência. Para isto o método utiliza uma avaliação inicial do valor da fração de líquido no instante atual, a fim de reduzir o número de iterações necessárias para a convergência.

No primeiro avanço de tempo, o fenômeno é altamente não linear, uma vez que o fluxo de calor inicial junto à parede, onde se inicia o processo de mudança de fase, tende a infinito. Certamente a solução numérica para este primeiro avanço de tempo possui maiores erros, pois todas as aproximações feitas são lineares. Estas aproximações podem ser tão distantes da realidade, que não permitem a convergência da solução. Neste caso, opta-se por não iterar a solução no primeiro avanço de tempo. O importante é verificar a capacidade do método numérico rapidamente tender para a solução exata, mesmo com resultados ruins nos primeiros avanços de tempo. Esta capacidade será mostrada para o novo método na seção seguinte, onde são apresentadas algumas soluções. Para as soluções utilizando o novo método, a primeira avaliação da posição da interface, no primeiro avanço de tempo, é feita



utilizando-se um modelo bastante grosseiro, baseado na solução de Stefan simplificada, dada por

$$\delta = \sqrt{2Ste\alpha t} \quad (4.83)$$

onde

$\delta = x_f$	-é a posição da frente de mudança de fase avaliada para o primeiro avanço de tempo.
$Ste = c(T - T_f)/\lambda$	-é o número de Stefan característico do problema.
$\alpha$	-é a difusividade térmica do material.
$t = \Delta t$	-é o tempo decorrido para o primeiro avanço de tempo.

Nos demais avanços de tempo, a primeira avaliação da fração de líquido é feita, considerando a velocidade da frente de mudança de fase constante. Com a avaliação da nova posição da interface, calcula-se a nova fração de líquido avaliada.

#### 4.3.4- Comparação das Soluções Numéricas e Analítica

O efeito da interpolação linear para o cálculo da temperatura no volume em mudança de fase, Eq. (4.75), é estudado através da figura 4.18. Nela são mostradas as soluções dos problemas apresentados na seção 4.1.4, da mesma forma linearizadas por meio da solução analítica, mas, neste caso, utilizando-se a interpolação linear, Eq. (4.75), para gerar os coeficientes do volume em mudança de fase. Isto é, neste volume a equação de conservação da energia não é resolvida e a sua temperatura é calculada por meio de interpolação linear com relação aos seus vizinhos.

Para o novo método, a equação da energia no volume em mudança de fase gera um balanço para prever a fração de líquido no instante atual. A posição da interface, calculada desta maneira, isto é, a partir deste balanço, é apresentada na figura 4.19.

É importante ressaltar que os métodos 0 e 1 ficam idênticos quando se faz a interpolação linear da temperatura no volume em mudança de fase, assim como os métodos 2 e 3. Basta observar que a derivada com relação à temperatura no ponto em mudança de fase recai na derivada com relação à interface, uma vez que a interpolação linear relaciona as duas. Por isto, nas figuras a seguir apenas uma solução é plotada, sendo chamada de método 1, mas, lembra-se que o método 0 produz o mesmo resultado, e no caso do método 3, lembra-se que o método 2 leva a mesmo resultado.

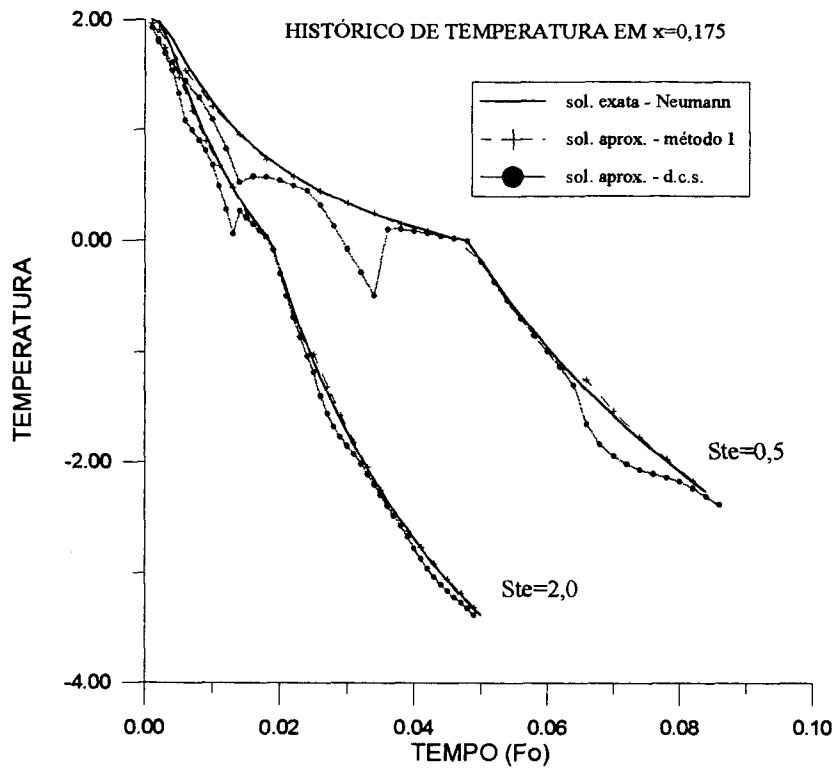


Fig. 4.18- Efeito da interpolação linear da temperatura no volume em mudança de fase

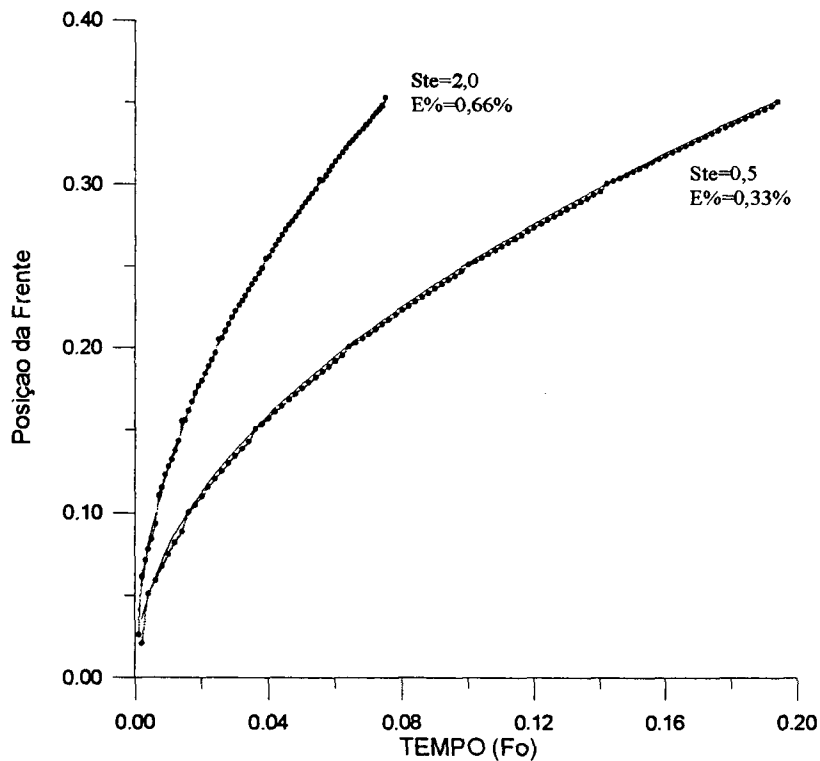


Fig. 4.19- Previsão da posição da interface por balanço no volume em mudança de fase

Na figura 4.19 apenas o resultado relativo aos métodos 0 e 1 foi plotado pois a solução para os métodos 2 e 3 são praticamente coincidentes. O erro médio percentual para a previsão da posição da frente pelo balanço de energia, para o problema com  $Ste=0.5$ , é de 0.16% nos métodos 0 e 1. Para os métodos 2 e 3 o erro médio é de 0.11%, portanto, um pouco inferior. Usando a aproximação em diferenças centrais simples (d.c.s.), o erro médio para o mesmo problema é de 0.33%.

A comparação entre os métodos é feita através das figuras 4.20, 4.21 e 4.22, 4.23. Nelas são resolvidos problemas de solidificação, com as mesmas condições de temperatura, mas com diferentes valores de número de Stefan. Na figura 4.20 são apresentados os históricos de temperatura calculados pelo novo método, sem correção dos fluxos para interface mudando de volume. Pode-se comparar com a figura 4.21, onde a solução dos mesmos casos é obtida com o método de Voller [89], conforme apresentado na seção 3.3.2. Verifica-se que o fato do método de Voller fazer a temperatura nula no volume em mudança de fase, cria uma série de “degraus” na curva da temperatura.

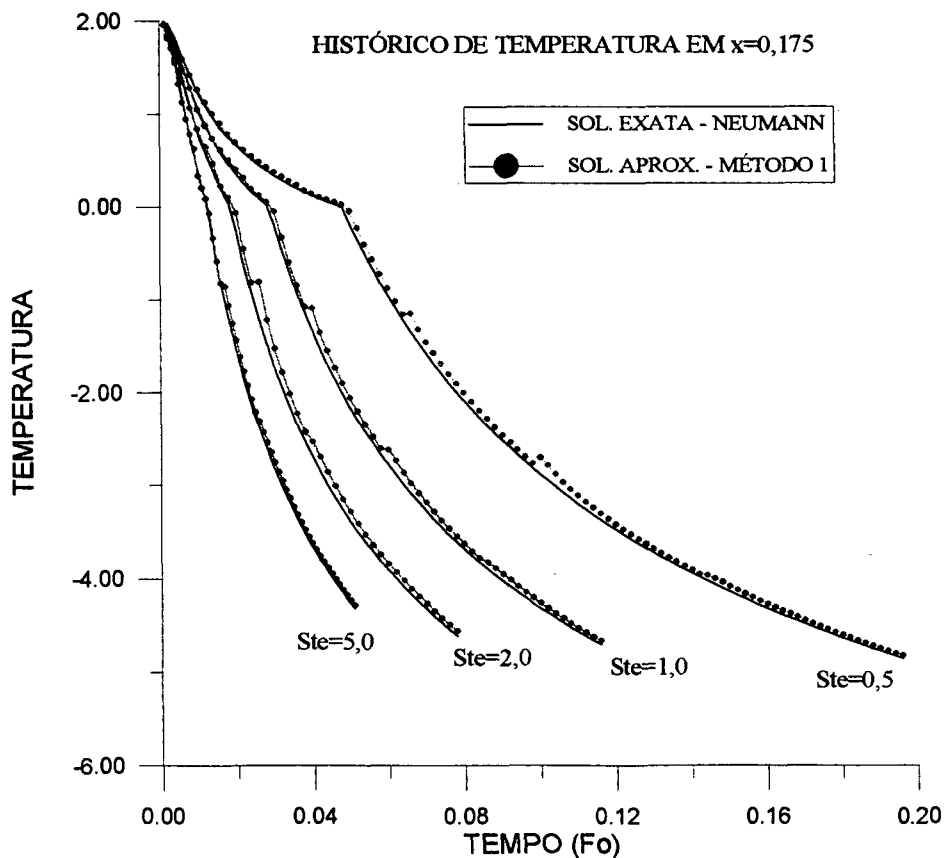


Fig. 4.20- Histórico da temperatura para o novo método

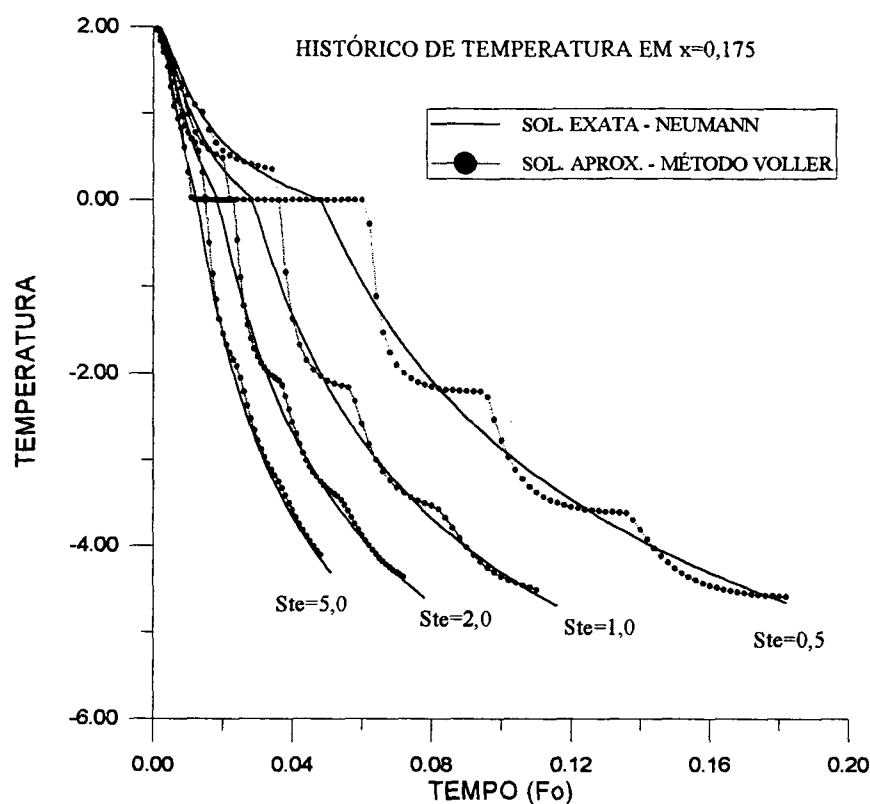


Fig. 4.21- Histórico da temperatura para o método de Voller

Nas figuras 4.22 e 4.23 são apresentadas as previsões da posição da interface utilizando-se o novo método e o método de Voller, respectivamente.

Apesar da aproximação muito pobre no histórico da temperatura, o método de Voller consegue prever razoavelmente a posição da interface. Na verdade, desde que haja conservação da energia, o cálculo da posição da interface não apresenta grandes erros. Pode-se por alguns instantes atrasá-la, em outros adiantá-la, mas, se houver conservação de energia, não aparecerão erros maiores.

A tabela 4.1, a seguir, apresenta os valores de erros médios nos cálculos da posição da interface. Não houve qualquer cuidado adicional para redução dos erros ou otimização da solução. Particularmente o novo método melhora em muito o seu desempenho com um refinamento dos avanços de tempo no início da solução, quando os gradientes são maiores. Mesmo assim, verifica-se que os erros percentuais médios são significativamente menores para tempos de processamento de mesma ordem.

TABELA 4.1 - Erro Médio Percentual na Posição da Interface

Ste	0.5	1.0	2.0	5.0
Voller	1.54%	1.57%	2.30%	3.22%
Novo	1.12%	1.25%	1.68%	1.73%

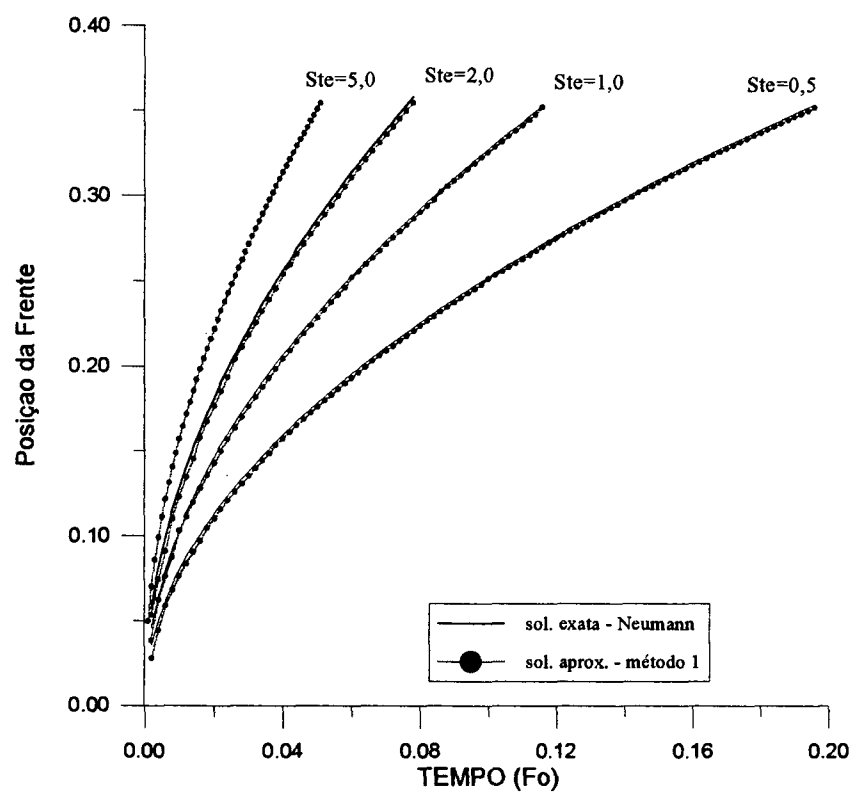


Fig. 4.22 - Posição da interface para o novo método

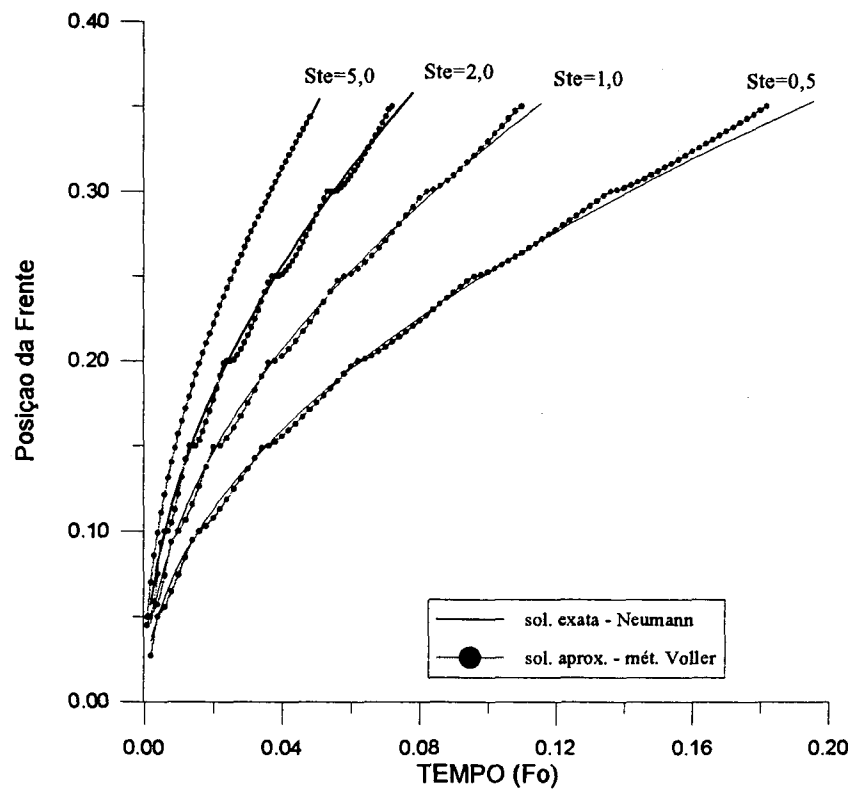


Fig. 4.23- Posição da interface para o método de Voller

Na Fig. 4.20 verifica-se que o método em um domínio com acompanhamento da interface é capaz de prever bem o valor da temperatura, mas, verifica-se a presença de alguns “picos” irrealistas como se a temperatura no ponto houvesse aumentado. Esta é uma situação fisicamente impossível em se tratando de uma solidificação, quando a temperatura num ponto somente diminui. A fim de interpretar melhor este fenômeno, a Fig. 4.24 mostra a variação da temperatura nos quatro primeiros pontos da malha e a posição da interface num mesmo gráfico.

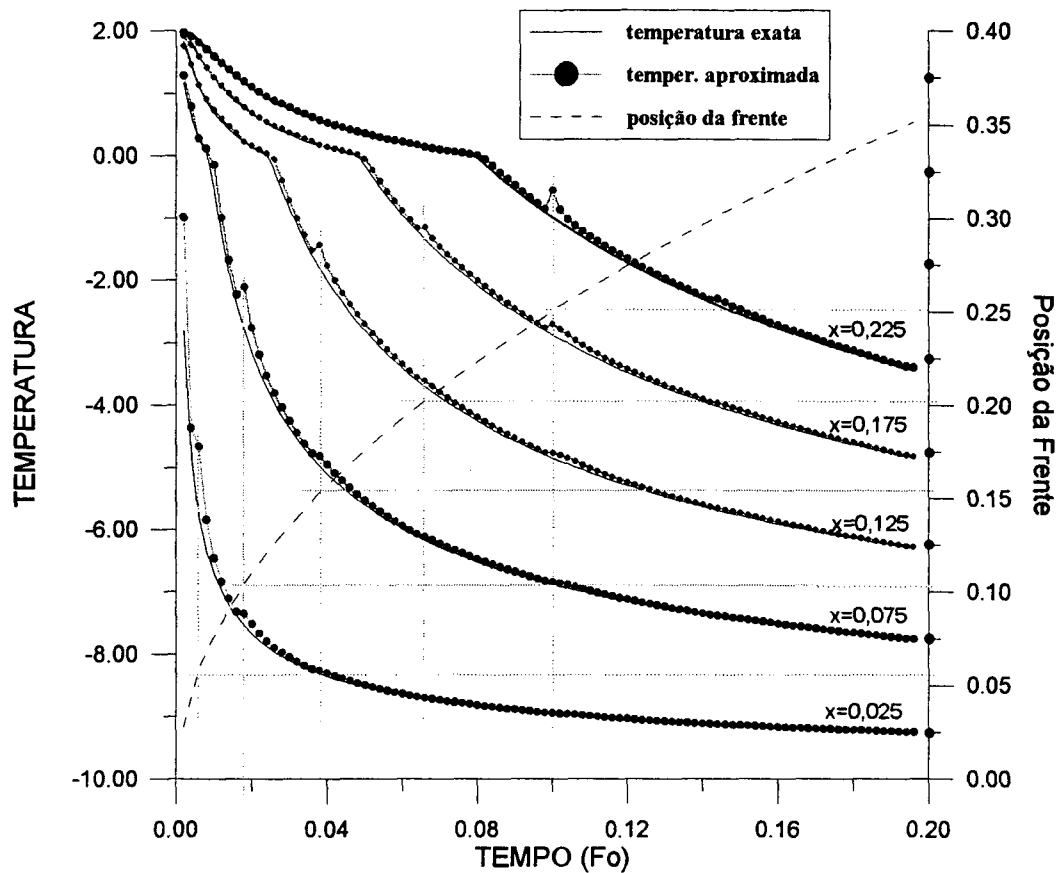


Figura 4.24 - Histórico de temperatura e posição da frente

Uma análise da Fig. 4.24 permite concluir que os “picos” ocorrem no primeiro avanço de tempo em que a frente muda de volume. É fácil perceber a origem deste erro numérico. Enquanto a frente permanece em um volume a sua temperatura é obtida por interpolação linear, não representando um valor integrado no volume e sim pontual. Quando a frente sai do volume, a temperatura passa a representar o valor integrado no volume. Esta diferença de cálculo causa o erro numérico perceptível nas curvas de temperatura. Alguns artifícios foram buscados a fim de minorar este efeito, mas todos eles aumentariam a complexidade do método sem melhoras significativas, por isto foram abandonados.

O efeito do número de Stefan do problema na qualidade da solução pode ser avaliado por meio das figuras 4.20 e 4.22, e pela tabela 4.1. Verifica-se que o aumento do número de Stefan concorre para o aumento do erro da solução aproximada, uma vez que a velocidade de deslocamento da interface é maior. O novo método apresenta alguma dificuldade de convergência nos primeiros avanços de tempo para problemas com elevados valores de  $Ste$ , requerendo menores avanços de tempo no início da solução. Nas soluções aqui apresentadas, somente para  $Ste=5.0$  houve a necessidade de redução do avanço de tempo. Para todas as soluções o avanço de tempo usado, em termos de Fourier, foi  $\Delta t=0.002$ . Nas soluções para  $Ste=5.0$ , nos dois métodos, foram utilizados avanços de tempo adimensionais de  $\Delta t=0.001$ .

O efeito da primeira avaliação da fração de líquido, no primeiro avanço de tempo é mostrado através da figura 4.25. Nela se verifica que, apesar de uma avaliação inicial muito grosseira, rapidamente a solução aproximada se corrige, se aproximando da solução analítica. A primeira avaliação utilizada foi a solução de Stefan simplificada, Eq. (4.82), apresentada anteriormente.

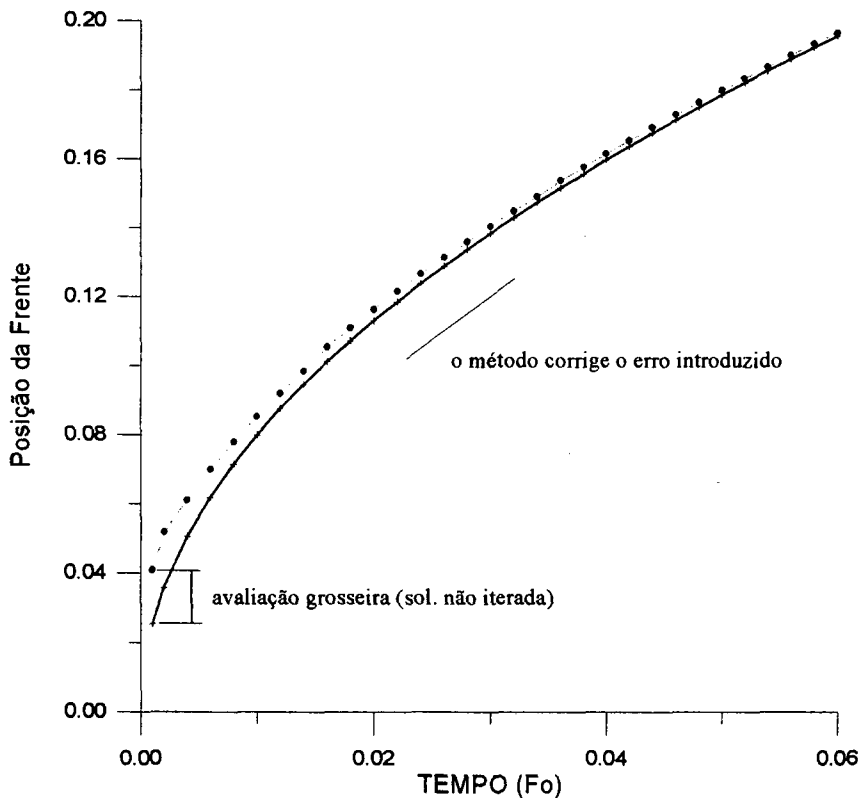


Fig. 4.25- Efeito da primeira avaliação da fração de líquido

#### 4.3.5 - Conclusões

Com base nas soluções apresentadas, o novo método proposto tem as seguintes vantagens:

- apresenta excelente capacidade de prever a temperatura no domínio de solução, o que pode ser comprovado nas figuras 4.9 e 4.20. Até o presente, somente o método de Tacke [75] havia apresentado tal habilidade, porém, com as desvantagens de ser um método explícito e somente unidimensional. Comparando com o método de Voller [89], figura 4.21, fica ainda mais evidente a superioridade do novo método com relação ao cálculo do perfil de temperatura.
- é capaz de prever a posição da frente de mudança de fase com erros muito pequenos, em torno de 1%-2%, conforme a Tabela 4.1. Para mesmos avanços de tempo, prevê a posição da interface com erros médios menores que o método de Voller, usando tempos computacionais compatíveis.
- funciona bem para pequenos e grandes valores do número de Stefan, como pode ser verificado nas soluções das figuras 4.20 e 4.22.
- é capaz de corrigir erros introduzidos no início da solução, quando os efeitos de não linearidade da solução são mais importantes. Este fato foi mostrado através da figura 4.24.
- é capaz de simular problemas com diferentes valores de propriedades térmicas nas diferentes fases. Não há necessidade de qualquer artifício numérico para este fim, uma vez que durante a solução não há nenhuma derivada que envolva pontos dos dois domínios, ou melhor, das duas fases.
- é numericamente estável, apresentando convergência rápida. Admite a otimização de um fator de relaxação na correção da fração de líquido pelo balanço de energia. O valor usado nas soluções de uma forma geral foi de 0.5. O desempenho do método pode ser melhorado por meio da otimização desta relaxação. Porém, isto não é imperativo, ou seja, o método apresenta excelente desempenho com o valor constante utilizado.

A principal desvantagem do método é a introdução de outra não linearidade no problema, além do termo fonte. Os coeficientes dos volumes vizinhos ao volume em mudança de fase passam a depender da posição da interface, que é função da solução. O próprio balanço de energia, que é efetuado para calcular a fração de líquido no volume em mudança de fase, é



função da posição da interface. Resulta que maior número de iterações será necessário para a convergência da solução numérica. Felizmente, como somente os coeficientes dos volumes vizinhos à mudança de fase variam, a convergência é rápida.

## CAPÍTULO 5

### GENERALIZAÇÃO DO MÉTODO

#### 5.1 - REQUISITOS BÁSICOS

Como descrito no capítulo 4, o novo método necessita do acompanhamento da posição da frente de mudança de fase. Os fluxos de calor nas faces do volume em mudança de fase são calculados levando-se em consideração a posição da interface, onde a temperatura é conhecida ( $T_f=0$  : valor de referência). Como visto anteriormente, apesar de acrescentar algumas dificuldades, as vantagens do novo método são muitas, principalmente na sua capacidade de prever corretamente o perfil de temperatura no domínio de solução.

O cálculo mais preciso da temperatura é particularmente importante na solução de problemas envolvendo mudança de fase, com convecção natural na fase líquida. A convecção natural é dirigida pelo perfil de temperatura, que entra no termo fonte da equação do movimento, através da aproximação de Boussinesq, como mostrado na seção 2.3.2.

O desempenho do novo método para problemas bidimensionais será mostrado para a categoria de problemas nos quais se pode alinhar uma das coordenadas da malha à frente de mudança de fase. A solução numérica adotada utiliza malha estruturada, e, portanto, os volumes elementares da malha discreta são delimitados por linhas coordenadas. Na figura 5.1 são apresentados exemplos de problemas que pertencem a esta categoria, com um exemplo de malha estruturada alinhada à frente de mudança de fase (FMF) num dado instante. Nestes exemplos são utilizadas condições de contorno de temperatura de parede ( $T_p$ ) prescrita e parede adiabática, isto é, fluxo de calor ( $q_p=0$ ) nulo na parede. Para haver mudança de fase a temperatura na parede ( $T_p$ ) e a temperatura inicial ( $T_{in}$ ) devem estar assim relacionadas com a temperatura de mudança de fase ( $T_f=0$ )

$$\begin{cases} T_{in} > 0 \\ T_p < 0 \end{cases} \Rightarrow \text{solidificação}$$

$$\begin{cases} T_{in} < 0 \\ T_p > 0 \end{cases} \Rightarrow \text{fusão}$$

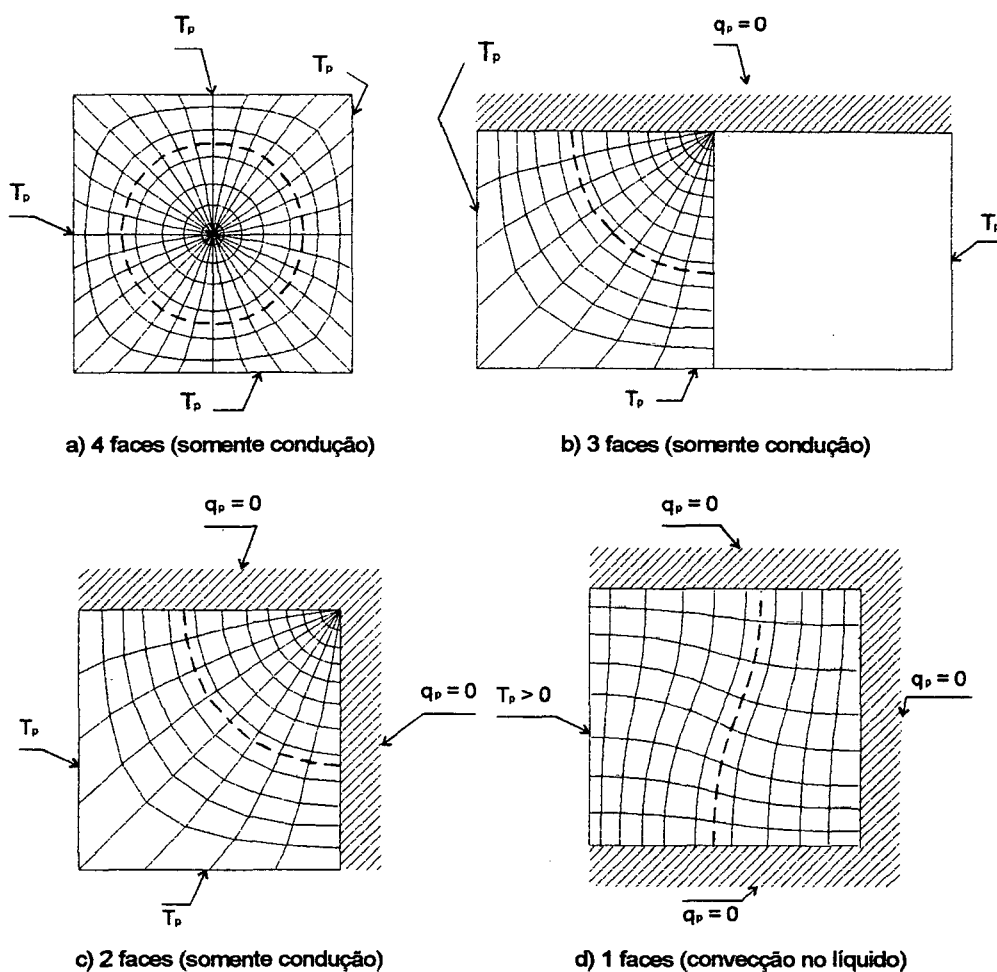


Fig. 5.1 - Problemas 2-D com malha alinhada à FMF

Com uma rápida observação das malhas apresentadas na figura 5.1, verifica-se a necessidade de utilização de coordenadas generalizadas para que seja possível o alinhamento da malha à posição da interface e também para o tratamento de geometrias arbitrárias. Além disto, utiliza-se malha móvel para que o alinhamento se dê mesmo com o movimento da interface no tempo. Isto é, a malha se alinha à interface, à medida que esta se deforma ao longo do tempo.

A necessidade de alinhamento da malha à posição da frente de mudança de fase surge por questões numéricas, para facilitar:

- o cálculo das derivadas com relação à posição da interface,
- o cálculo da posição da interface a partir do valor da fração de líquido nos volumes em mudança de fase, resultante do balanço de energia nestes volumes,
- a previsão da nova posição da interface.

Nas próximas seções deste capítulo, no qual o novo método generalizado é apresentado, mostra-se a necessidade do alinhamento da malha em cada uma destas etapas, e a simplificação do procedimento neste caso.

A seguir, será apresentada a teoria básica relativa a coordenadas generalizadas e como ficam as equações transformadas para o plano  $\xi$ - $\eta$ - $\tau$ .

## 5.2 - COORDENADAS GENERALIZADAS

### 5.2.1- Introdução

A solução numérica de equações diferenciais requer a discretização do domínio em pontos ou volumes elementares. As equações diferenciais são aproximadas por um conjunto de equações algébricas, relacionando as incógnitas em cada ponto, cuja solução produz valores discretos das variáveis em cada ponto da malha. Esses valores representam a solução aproximada da equação diferencial no domínio. Portanto, a forma da discretização do domínio, ou seja, a malha na qual a solução será calculada é de vital importância para a solução propriamente dita.

É fundamental diminuir os erros de discretização e interpolação junto às fronteiras, pois na maioria dos problemas, a solução é fortemente dependente das condições de contorno e é nessa região que aparecem os maiores gradientes. Qualquer erro próximo aos contornos é rapidamente propagado para o interior do domínio, comprometendo toda a solução. Por isso, é conveniente a utilização de malha coincidente com a fronteira, que é obtida por meio de um sistema coordenado natural para uma dada geometria.

Atualmente costuma-se trabalhar com sistemas de coordenadas generalizadas que resultam de geração de malhas coincidentes com as fronteiras do problema, permitindo maior generalidade da solução.

A seqüência de etapas para o tratamento de geometrias arbitrárias com coordenadas generalizadas é a seguinte. Inicialmente considera-se uma transformação de coordenadas do sistema cartesiano, por exemplo, para um sistema de coordenadas geral. Com as relações matemáticas de tal transformação, procede-se, a uma transformação das equações para o sistema coordenado generalizado. As equações assim transformadas se aplicam a qualquer sistema coordenado, desde que sejam conhecidas as métricas da transformação. As métricas são determinadas para cada geometria, pela geração de uma malha conveniente ao problema, certamente, coincidente com a fronteira. Existem diversos métodos para geração de malhas coincidentes com a fronteira. Este tema não será tratado neste trabalho, podendo ser encontrado em [110] e [115].

Deseja-se ressaltar que a obtenção da malha, ou seja, do próprio sistema coordenado utilizado na discretização do domínio é um processo independente da solução do problema físico. O programa computacional que

resolve as equações de conservação transformadas em coordenadas generalizadas é geral, podendo ser aplicado a qualquer geometria de uma mesma família, desde que as métricas sejam conhecidas. O programa gerador da malha é responsável pelo cálculo das métricas as quais serão informadas ao programa de solução dos problemas físicos. O programa gerador de malhas também pode ser geral, apenas necessitando de dados a respeito da localização dos pontos na fronteira do domínio.

Nas seções a seguir, descreve-se o procedimento para utilização de coordenadas generalizadas no método de solução de problemas de mudança de fase. Os detalhes matemáticos serão evitados, por estarem amplamente documentados na literatura corrente. A fundamentação teórica aqui utilizada pode ser encontrada em Maliska [110].

### 5.2.2- Transformação Geral de Coordenadas Dependentes do Tempo

Faz-se uma transformação de coordenadas de um plano físico  $(x,y,t)$ , escolhido cartesiano, para um plano transformado  $(\xi,\eta,\tau)$ , através de

$$\begin{cases} \xi = \xi(x,y,t) \\ \eta = \eta(x,y,t) \\ \tau = t \end{cases} \quad (5.1)$$

Mediante esta transformação, uma grande classe de geometrias poderá ser representada no plano transformado por meio de uma geometria retangular. Este fato é ilustrado na Fig. 5.2.

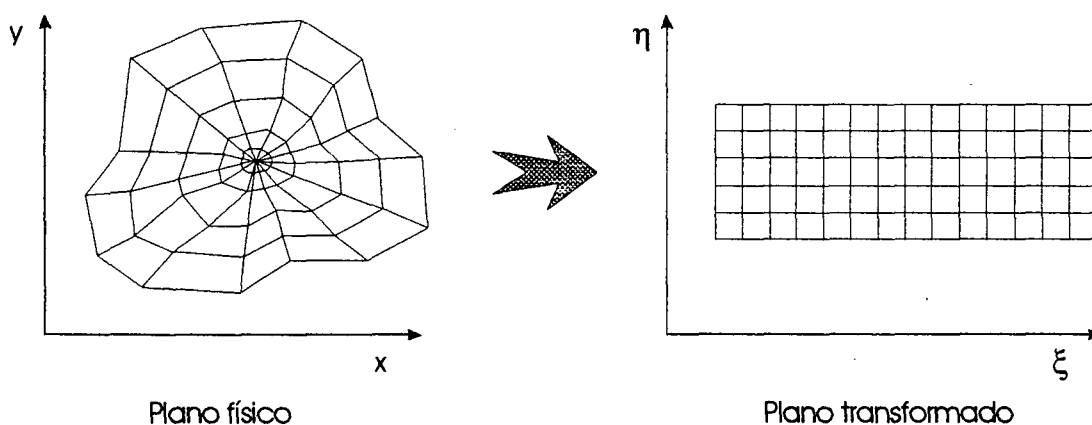


Fig 5.2 - Plano físico e plano transformado

Por isso, quando se utiliza a formulação em coordenadas generalizadas, o domínio computacional é sempre retangular e fixo, independente da geometria do problema e de variações temporais no domínio físico.

A teoria matemática associada a transformações de coordenadas é apresentada em vários livros, não sendo do interesse deste trabalho fazer um estudo aprofundado neste tema. Em Maliska [110] o uso de coordenadas generalizadas em volumes finitos é apresentado em detalhes. Em Thompson et al [115] encontra-se uma dedução detalhada das relações matemáticas decorrentes de tal transformação de coordenadas.

A partir da transformação de coordenadas apresentada na Eq. (5.1), as equações de conservação devem ser transformadas e escritas em termos das novas coordenadas  $\xi, \eta, \tau$ . Em [110] apresenta-se o procedimento para a transformação das equações de conservação do sistema cartesiano para o sistema generalizado. Parte-se de uma forma genérica de se representar as equações de conservação, na forma conservativa ou divergente,

$$\frac{\partial G}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{F} = S \quad (5.2)$$

onde  $\vec{F}$  é uma grandeza vetorial composta de termos convectivos e difusivos, que pode ser decomposta na base cartesiana como

$$\vec{F} = E \vec{i} + F \vec{j} \quad (5.3)$$

No sistema cartesiano 2-D, a Eq. (5.2) fica

$$\frac{\partial G}{\partial t} + \frac{\partial E}{\partial x} + \frac{\partial F}{\partial y} = S \quad (5.4)$$

Mostra-se em [110] que a Eq. (5.4) transformada fica

$$\frac{\partial \hat{G}}{\partial t} + \frac{\partial \hat{E}}{\partial \xi} + \frac{\partial \hat{F}}{\partial \eta} = \hat{S} \quad (5.5)$$

com

$$\hat{G} = G/J \quad (5.6)$$

$$\hat{S} = S/J \quad (5.7)$$

$$\hat{E} = (x_\eta y_\tau - x_\tau y_\eta) G + y_\eta E - x_\eta F \quad (5.8)$$

$$\hat{F} = (x_\tau y_\xi - x_\xi y_\tau) G - y_\xi E + x_\xi F \quad (5.9)$$

### 5.2.3- As Equações Transformadas

As equações de conservação podem ser apresentadas na forma genérica

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\Phi) + \nabla \cdot (\rho \tilde{V}\Phi) = \nabla \cdot (\Gamma^\Phi \nabla \Phi) + S^\Phi \quad (5.10)$$

onde  $\phi$  representa uma variável dependente genérica, podendo ser velocidade, temperatura, etc,  $\Gamma^\Phi$  é o coeficiente de transporte associado a  $\phi$  e  $S^\Phi$  o termo fonte da equação.

Comparando a Eq. (5.10) com a forma dada na Eq. (5.2) conclui-se que

$$\begin{aligned} G &= \rho\Phi \\ E &= \rho u\Phi - \Gamma^\Phi \frac{\partial \Phi}{\partial x} \\ F &= \rho v\Phi - \Gamma^\Phi \frac{\partial \Phi}{\partial y} \\ S &= S^\Phi \end{aligned} \quad (5.11)$$

E a Eq. (5.10) transformada para o sistema de coordenadas generalizado fica

$$\frac{\partial}{\partial \tau} \left( \frac{\rho\Phi}{J} \right) + \frac{\partial}{\partial \xi} (\rho \tilde{U}\Phi) + \frac{\partial}{\partial \eta} (\rho \tilde{V}\Phi) = \frac{\partial}{\partial \xi} \left( C_1^\Phi \frac{\partial \Phi}{\partial \xi} + C_2^\Phi \frac{\partial \Phi}{\partial \eta} \right) + \frac{\partial}{\partial \eta} \left( C_3^\Phi \frac{\partial \Phi}{\partial \eta} + C_2^\Phi \frac{\partial \Phi}{\partial \xi} \right) + \hat{S}^\Phi \quad (5.12)$$

com as velocidades relativas transformadas dadas por

$$\tilde{U} = y_\eta (u - x_\tau) - x_\eta (v - y_\tau) \quad (5.13)$$

$$\tilde{V} = x_\xi (v - y_\tau) - y_\xi (u - x_\tau) \quad (5.14)$$

e os coeficientes de transporte transformados são

$$C_1^\Phi = \Gamma^\Phi J\alpha \quad (5.15)$$

$$C_2^\Phi = -\Gamma^\Phi J\beta \quad (5.16)$$

$$C_3^\Phi = \Gamma^\Phi J\gamma, \quad (5.17)$$

onde  $J$  é o jacobiano da transformação e  $\alpha, \beta, \gamma$  são as métricas, como mostrado em [110].

É importante ressaltar que a variável dependente  $\phi$ , permanece a mesma quer no sistema cartesiano, quer no generalizado.

A seguir, apresentam-se as equações de conservação transformadas para coordenadas generalizadas.

### - Equação da conservação da massa

A partir da Eq.(5.12), fazendo  $\phi=1$ ,  $\Gamma^\phi=0$  e  $S^\phi=0$ , obtém-se a equação da conservação da massa

$$\frac{\partial}{\partial \tau} \left( \frac{\rho}{J} \right) + \frac{\partial}{\partial \xi} (\rho \tilde{U}) + \frac{\partial}{\partial \eta} (\rho \tilde{V}) = 0 \quad (5.18a)$$

Como utilizou-se a aproximação de Boussinesq para tratar a convecção natural, o fluido pode ser considerado incompressível:  $\rho=\rho(\xi,\eta,\tau)=\text{constante}$ . Neste caso, a Eq.(5.18a) fica

$$\frac{\partial}{\partial \tau} \left( \frac{1}{J} \right) + \frac{\partial \tilde{U}}{\partial \xi} + \frac{\partial \tilde{V}}{\partial \eta} = 0 \quad (5.18b)$$

### - Equação da conservação da quantidade de movimento

#### Na direção x

Com  $\phi=u$ ,  $\Gamma^\phi=\mu$  e  $S^\phi=-\partial p/\partial x$ , na Eq.(5.12), obtém-se

$$\frac{\partial}{\partial \tau} \left( \frac{\rho u}{J} \right) + \frac{\partial}{\partial \xi} (\rho \tilde{U} u) + \frac{\partial}{\partial \eta} (\rho \tilde{V} u) = \frac{\partial}{\partial \xi} \left( C_1^u \frac{\partial u}{\partial \xi} + C_2^u \frac{\partial u}{\partial \eta} \right) + \frac{\partial}{\partial \eta} \left( C_3^u \frac{\partial u}{\partial \eta} + C_2^u \frac{\partial u}{\partial \xi} \right) + \hat{S}^u \quad (5.19)$$

$$\hat{S}^u = -\frac{1}{J} \frac{\partial p}{\partial x} = -\frac{1}{J} (p_\xi \xi_x + p_\eta \eta_x) = y_\xi p_\eta - y_\eta p_\xi \quad (5.20)$$

e os coeficientes de difusão são dados a seguir

$$C_1^u = \mu J \alpha \quad (5.21)$$

$$C_2^u = -\mu J \beta \quad (5.22)$$

$$C_3^u = \mu J \gamma \quad (5.23)$$



**Na direção y**

Com  $\phi=v$ ,  $\Gamma^\phi=\mu$  e  $S^\phi=-\partial p/\partial y + \rho g \beta_o(T-T_o)$ , na Eq. (5.12), obtém-se

$$\frac{\partial}{\partial \tau} \left( \frac{\rho v}{J} \right) + \frac{\partial}{\partial \xi} (\rho \tilde{U} v) + \frac{\partial}{\partial \eta} (\rho \tilde{V} v) = \frac{\partial}{\partial \xi} \left( C_1^v \frac{\partial v}{\partial \xi} + C_2^v \frac{\partial v}{\partial \eta} \right) + \frac{\partial}{\partial \eta} \left( C_3^v \frac{\partial v}{\partial \eta} + C_2^v \frac{\partial v}{\partial \xi} \right) + \hat{S}^v \quad (5.24)$$

onde

$$\hat{S}^v = -\frac{1}{J} \frac{\partial p}{\partial y} + \frac{1}{J} \rho g \beta_o (T - T_o) = (x_\xi p_\eta - x_\eta p_\xi) + \frac{1}{J} \rho g \beta_o (T - T_o) \quad (5.25)$$

e os coeficientes de difusão são iguais aos dados nas Eqs. (5.21-5.23) para a velocidade u.

**- Equação de conservação da energia**

Parte-se da equação da energia com a temperatura como variável dependente, e o termo fonte dado em termos da fração de líquido, como apresentada no capítulo 2, e transcrita a seguir

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho c T) + \nabla \cdot (\rho \tilde{V} c T) - \nabla \cdot (k \nabla T) = -\lambda \frac{\partial}{\partial t} (\rho f) \quad (2.18)$$

Comparando-a com a Eq. (5.10) tem-se  $\phi=T$ ,  $\Gamma^\phi=k/c_p$  e  $S^\phi=-(\rho \lambda / c_p) \partial f / \partial t$ . Substituindo na Eq. (5.12) obtém-se a equação transformada

$$\frac{\partial}{\partial \tau} \left( \frac{\rho T}{J} \right) + \frac{\partial}{\partial \xi} (\rho \tilde{U} T) + \frac{\partial}{\partial \eta} (\rho \tilde{V} T) = \frac{\partial}{\partial \xi} \left( C_1^T \frac{\partial T}{\partial \xi} + C_2^T \frac{\partial T}{\partial \eta} \right) + \frac{\partial}{\partial \eta} \left( C_3^T \frac{\partial T}{\partial \eta} + C_2^T \frac{\partial T}{\partial \xi} \right) + \hat{S}^T \quad (5.26)$$

com

$$\hat{S}^T = -\frac{\rho \lambda}{c_p} \frac{\partial}{\partial \tau} \left( \frac{f}{J} \right) \quad (5.27)$$

e os coeficientes de difusão ficam

$$C_1^T = \frac{k}{c_p} J \alpha \quad (5.28)$$

$$C_2^T = -\frac{k}{c_p} J \beta \quad (5.29)$$

$$C_3^T = \frac{k}{c_p} J \gamma \quad (5.30)$$

### 5.3 - MALHA MÓVEL

#### 5.3.1- Conservação da Massa com Malha Móvel

Inicialmente apresenta-se uma interpretação física para as velocidades relativas transformadas  $\tilde{U}$  e  $\tilde{V}$  dadas nas Eqs.(5.13) e (5.14). A Fig.5.3 representa um escoamento com velocidade  $\vec{V}$  em um volume móvel no tempo.

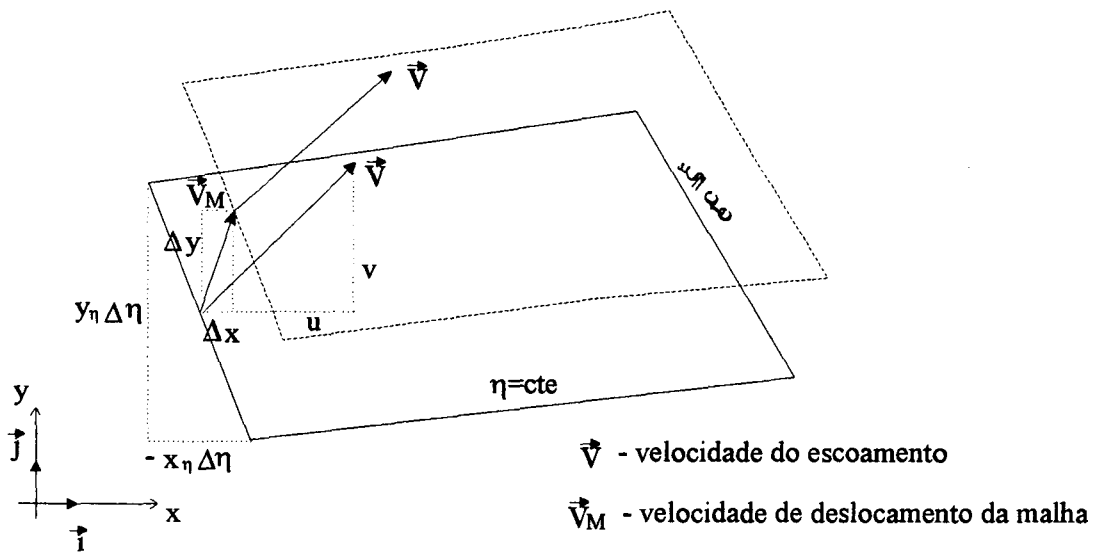


Fig. 5.3 - Volume móvel no tempo

O fluxo de massa passando pelas faces do volume móvel deve ser calculado em função das velocidades relativas entre o escoamento e a malha. A velocidade do escoamento é dada em coordenadas cartesianas como

$$\vec{V} = u\vec{i} + v\vec{j} \quad (5.31)$$

e a velocidade de malha

$$\vec{V}_M = \frac{\Delta x}{\Delta \tau}\vec{i} + \frac{\Delta y}{\Delta \tau}\vec{j} = x_\tau\vec{i} + y_\tau\vec{j} \quad (5.32)$$

Com base na Fig.5.3, verifica-se que o fluxo de massa entrando pela face oeste do volume é dado por

$$\dot{m} = \rho[(u - x_\tau)y_\eta\Delta\eta - (v - y_\tau)x_\eta\Delta\eta] = \rho\tilde{U}\Delta\eta \quad (5.33)$$

De modo análogo, para a face sul,

$$\dot{m} = \rho \left[ (v - y_\tau) x_\xi \Delta \xi - (u - x_\tau) y_\xi \Delta \xi \right] = \rho \tilde{V} \Delta \xi \quad (5.34)$$

As velocidades relativas transformadas  $\tilde{U}$  e  $\tilde{V}$  levam a informação da resultante entre o escoamento e o movimento da malha, por isso aparecem nos termos convectivos da Eq. (5.12), ou seja, de todas as equações de conservação transformadas. Deve-se verificar também que apenas uma componente  $\tilde{U}$  e  $\tilde{V}$  é necessária para avaliar o fluxo convectivo em uma face do volume elementar, enquanto que as duas componentes cartesianas  $u$  e  $v$  estão envolvidas neste cálculo.

Do ponto de vista matemático, é fácil mostrar [110] que as componentes contravariantes do vetor velocidade,  $\tilde{V}$ , Eq. (5.31), são dadas por:

$$\begin{aligned} v^1 &= \xi_x u + \xi_y v = J(y_\eta u - x_\eta v) \\ v^2 &= \eta_x u + \eta_y v = J(x_\xi v - y_\xi u) \end{aligned} \quad (5.35)$$

Definindo  $U$  e  $V$ , componentes contravariantes sem normalização métrica, como:

$$\begin{aligned} U &= v^1 / J = y_\eta u - x_\eta v \\ V &= v^2 / J = x_\xi v - y_\xi u \end{aligned} \quad (5.36)$$

e, procedendo de forma análoga para o vetor velocidade da malha  $\tilde{V}_M$ , Eq. (5.32), obtêm-se suas componentes contravariantes sem normalização métrica:

$$\begin{aligned} U_M &= y_\eta x_\tau - x_\eta y_\tau \\ V_M &= x_\xi y_\tau - y_\xi x_\tau \end{aligned} \quad (5.37)$$

Assim, conclui-se que as velocidades relativas transformadas nada mais são que a diferença entre as componentes contravariantes sem normalização das duas velocidades, do escoamento e da malha, como mostrado a seguir:

$$\begin{aligned} \tilde{U} &= U - U_M \\ \tilde{V} &= V - V_M \end{aligned} \quad (5.38)$$

No cálculo do fluxo de massa na face oeste, feito na Eq. (5.33), e na face sul, Eq. (5.34), verifica-se que as componentes contravariantes da velocidade aparecem de uma forma natural, sendo necessária apenas uma componente em cada face, conforme ressaltado anteriormente. A componente  $\tilde{U}$  é a única responsável pelo fluxo passando por faces paralelas a  $\xi$  e  $\tilde{V}$  é

responsável pelo fluxo através de faces paralelas a  $\eta$ . Esta é a grande vantagem em se usar as componentes contravariantes, ao invés das covariantes ou das cartesianas, para fazer os avanços de velocidade no método de tratamento do acoplamento pressão-velocidade, apresentado no capítulo 6.

Uma preocupação importante no caso de se trabalhar com malha móvel é a de se garantir a conservação da massa nos volumes elementares do domínio de solução. Isto é, o movimento da malha não deve causar erros na conservação da massa. Este tem sido um tema estudado por diversos pesquisadores, gerando as conhecidas "*SCL- Space Conservation Law*", "*Lei de Conservação do Espaço*", [118], ou "*GCL- Geometrical Conservation Law*", "*Lei de Conservação Geométrica*", [58,60]. Sem maiores rigorismos matemáticos, este assunto é apresentado a seguir, com o principal objetivo de mostrar qual o procedimento a seguir para garantir a conservação da massa no caso de malha móvel.

Parte-se da equação de conservação da massa transformada, com  $\rho = \rho(\xi, \eta, \tau) = \text{constante}$ , dada pela Eq.(5.19)

$$\frac{\partial}{\partial \tau} \left( \frac{1}{J} \right) + \frac{\partial \tilde{U}}{\partial \xi} + \frac{\partial \tilde{V}}{\partial \eta} = 0 \quad (5.18b)$$

Para solução em volumes finitos, ela é discretizada integrando-se no volume e no tempo, ficando

$$\left( \frac{1}{J} - \frac{1}{J^0} \right) \Delta \xi \Delta \eta + (\tilde{U}_e - \tilde{U}_w) \Delta \eta \Delta t + (\tilde{V}_n - \tilde{V}_s) \Delta \xi \Delta t = 0 \quad (5.39)$$

Se não houver velocidade no escoamento, isto é, para a solução trivial com  $u=0$  e  $v=0$ , as velocidades relativas transformadas ficam iguais às velocidades contravariantes da malha sem normalização

$$\begin{aligned} \tilde{U} &= U_M = y_\eta x_\tau - x_\eta y_\tau \\ \tilde{V} &= V_M = x_\xi y_\tau - y_\xi x_\tau \end{aligned} \quad (5.40)$$

Na Eq. (5.39) vem

$$\left( \frac{1}{J} - \frac{1}{J^0} \right) \Delta \xi \Delta \eta + (U_{M,e} - U_{M,w}) \Delta \eta \Delta t + (V_{M,n} - V_{M,s}) \Delta \xi \Delta t = 0 \quad (5.41)$$

Esta agora é uma equação de conservação de espaço, ou de conservação geométrica. O primeiro termo representa a variação da área do volume no intervalo de tempo  $\Delta t$ , o segundo termo possui duas parcelas representando respectivamente a área que sai no movimento da face leste menos a que entra no movimento da face oeste, e, de modo semelhante, o terceiro termo

representa a área que sai no movimento da face norte menos a que entra na face sul. Como os fluxos de massa resultam do produto de velocidades por áreas, se as áreas não forem conservadas com o movimento da malha, erros serão introduzidos na conservação da massa.

Verifica-se que devem ser tomados cuidados especiais para que esta equação seja satisfeita. Em alguns trabalhos esta equação foi utilizada para calcular a velocidade da malha e era resolvida concomitantemente com a solução do problema. Neste trabalho, assim como feito em [58,60,118], utiliza-se uma discretização para as velocidades da malha nas faces, tal que a lei de conservação geométrica, Eq. (5.41) seja satisfeita a priori.

Em [118] obtém-se uma discretização para geometria cartesiana, 2-D, para a qual demonstra-se que a lei de conservação do espaço é obedecida.

Em [60], apresenta-se uma discretização em coordenadas generalizadas, que satisfaz a Eq. (5.41), ou seja, garante a conservação geométrica. Esta consiste em avaliar as componentes da velocidade contravariante da malha nas faces, por diferenças centrais, no instante de tempo  $t^0 + \Delta t/2$ , ficando

$$\begin{aligned} U_{M,e} &= y_{\eta,e}^{(1/2)} x_{\tau,e} - x_{\eta,e}^{(1/2)} y_{\tau,e} = \\ &= \frac{1}{2\Delta t} \left\{ (y_{\eta,e} + y_{\eta,e}^0)(x_e - x_e^0) - (x_{\eta,e} + x_{\eta,e}^0)(y_e - y_e^0) \right\} \end{aligned} \quad (5.42)$$

De modo semelhante, a aproximação da velocidade contravariante da malha na face norte é dada por

$$\begin{aligned} V_{M,n} &= x_{\xi,n}^{(1/2)} y_{\tau,n} - y_{\xi,n}^{(1/2)} x_{\tau,n} = \\ &= \frac{1}{2\Delta t} \left\{ (x_{\xi,n} + x_{\xi,n}^0)(y_n - y_n^0) - (y_{\xi,n} + y_{\xi,n}^0)(x_n - x_n^0) \right\} \end{aligned} \quad (5.43)$$

Utilizando aproximações semelhantes para avaliar as velocidades nas outras faces e substituindo na Eq. (5.41), após alguns algebrismos, pode-se mostrar que todos os termos se anulam e a lei de conservação geométrica é satisfeita.

### 5.3.2- Tipos de Malha Móvel Usados

Dois tipos de malha móvel serão utilizados, definindo dois métodos distintos. São eles

- malha coincidente com a interface, para a qual se utiliza a Transformação de Landau. É a malha móvel comumente utilizada nas soluções pelo método da temperatura, existindo uma mesma linha da malha sempre

coincidente com a interface, separando as duas fases. Tem o inconveniente de possuir número fixo de malhas em cada domínio, que se expande ou comprime à medida que o domínio cresce ou diminui. Este método de adaptação da malha se encontra descrito na seção 3.2.2.

- malha ajustável, que não necessariamente coincide com a interface, apenas, de tempos em tempos, se ajusta à posição desta, tornando-se aproximadamente paralela. Neste caso, a frente de mudança de fase caminha pela malha discreta, mudando de volume após alguns avanços de tempo. Assim sendo, não existe mais a restrição de número constante de malhas em cada domínio. Porém, como geralmente, à medida que a interface caminha ela vai se deformando, a malha deve se ajustar para manter um certo paralelismo entre uma das linhas coordenadas e a interface.

Os dois métodos diferem na sua concepção. O primeiro deles se aproxima do método da temperatura, porém, ao invés de se aplicar a condição de interface, utiliza-se o balanço de energia nos volumes em mudança de fase no avanço de tempo. A figura 5.4 mostra como fica a malha para um dado instante da solução.

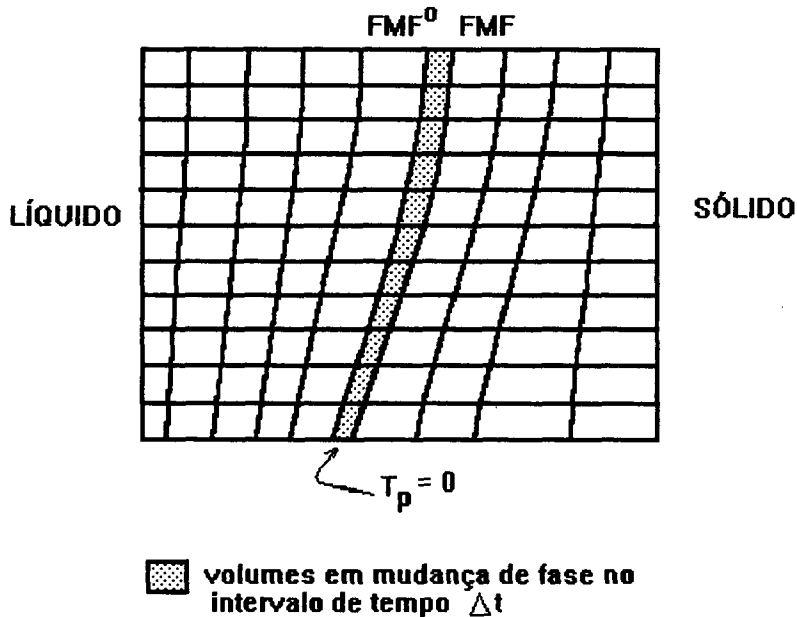


Fig. 5.4- Método com malha coincidente com a interface

Como se vê na figura 5.4, existe uma coluna de volumes em mudança de fase, que são limitados pela posição da interface no instante anterior e pela atual. A temperatura nestes volumes é conhecida, igual à temperatura de mudança de fase, feita nula como referência. A equação da energia é, então, utilizada para calcular o volume de material que mudou de fase, ou seja, para posicionar corretamente a interface. Este método é semelhante ao método de Voller, mas agora, com malha móvel, permitindo que a temperatura seja feita nula somente no volume de material que realmente se encontra em mudança de fase.

O segundo método se assemelha mais ao método unidimensional descrito no capítulo anterior. Mais precisamente, utiliza-se a idéia básica do método 1, descrito na seção 4.1.2. A posição da interface é acompanhada em cada linha que liga os centros de volume. A nova posição da interface é obtida da fração de líquido, calculada para os volumes em mudança de fase através do balanço de energia. Para relacionar a fração de líquido à posição da interface, considera-se que esta é paralela a uma das linhas coordenadas, como mostrado na figura 5.5.

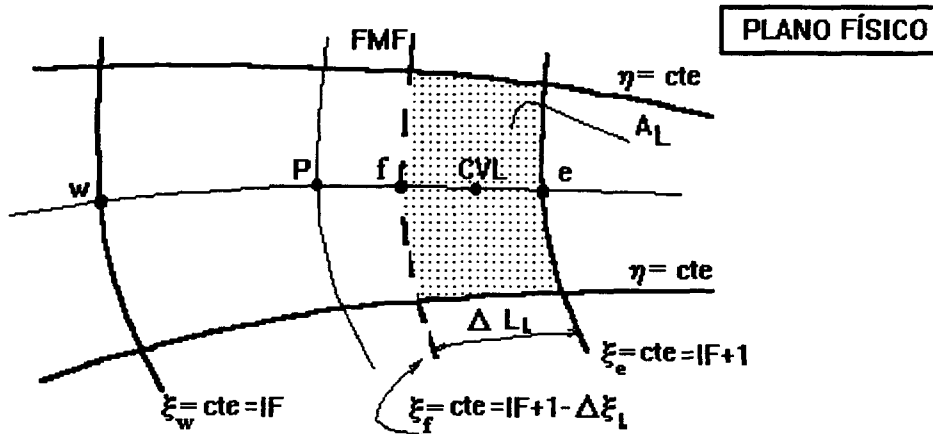


Fig. 5.5- Relação entre a fração de líquido e a posição da interface

A fração de líquido é dada pela relação entre a área de líquido,  $A_L$ , e a área total do volume  $P$ ,  $A_P$ .

$$f = A_L / A_P \quad (5.44)$$

Conforme mostrado em [110], a área no plano físico está relacionada à área no plano transformado pelo inverso do jacobiano da transformação.

Como arbitra-se o valor unitário à área do volume no plano transformado, o inverso do jacobiano é a própria área do volume no plano físico. Então,

$$A_P = I_P = [x_\xi y_\eta - x_\eta y_\xi]_P \quad (5.45)$$

De modo similar, a área do volume de líquido é dada pelo inverso do jacobiano calculado no centro do volume de líquido (CVL), como representado na figura 5.5,

$$A_L = I_{CVL} = [x_\xi y_\eta - x_\eta y_\xi]_{CVL} \quad (5.46)$$

Agora, substituindo na definição da fração de líquido, Eq. (5.44), chega-se a

$$f = \frac{I_{CVL}}{I_P}, \quad (5.47)$$

É importante ressaltar que a FMF é considerada paralela às linhas  $\xi=\text{constante}$  em todo este desenvolvimento.

Com base na figura 5.5, o comprimento  $\Delta L_L$ , medido sobre uma linha  $\eta=\text{constante}$ , como mostrado em [110], pode ser dado como

$$\Delta L_L = \sqrt{\gamma} \Delta \xi_L = \sqrt{\gamma_{CVL}} \quad (5.48)$$

Novamente se reportando à figura 5.5, é fácil verificar a proporcionalidade

$$\frac{x_e - x_w}{\sqrt{\gamma}} = \frac{x_e - x_f}{\Delta L_L} = \frac{x_e - x_f}{\sqrt{\gamma_{CVL}}} = \frac{x_e - x_f}{\sqrt{\gamma} \Delta \xi_L} \quad (5.49)$$

Considerando que

$$\begin{aligned} (x_\xi)_P &= x_e - x_w \\ (x_\xi)_{CVL} &= x_e - x_f \end{aligned} \quad (5.50)$$

conclui-se que

$$(x_\xi)_{CVL} = \Delta \xi_L (x_\xi)_P \quad (5.51)$$

A Eq. (5.51) considera que as variações são lineares dentro do volume. De modo semelhante pode-se obter as demais derivadas para o volume de líquido.

Assim, o cálculo do inverso do jacobiano no centro do volume líquido é feito usando as derivadas a seguir



$$\begin{aligned}(x_{\xi})_{CVL} &= \Delta\xi_L (x_{\xi})_P \\ (y_{\xi})_{CVL} &= \Delta\xi_L (y_{\xi})_P\end{aligned}\tag{5.52}$$

$$\begin{aligned}(x_{\eta})_{CVL} &= \frac{1}{2} \left[ (2 - \Delta\xi_L) x_{\eta,e} + \Delta\xi_L x_{\eta,w} \right] \\ (y_{\eta})_{CVL} &= \frac{1}{2} \left[ (2 - \Delta\xi_L) y_{\eta,e} + \Delta\xi_L y_{\eta,w} \right]\end{aligned}\tag{5.53}$$

que são obtidas considerando-se variações lineares dentro do volume. O inverso do jacobiano no centro do volume líquido fica

$$I_{CVL} = \Delta\xi_L \left\{ x_{\xi,P} \frac{1}{2} \left[ (2 - \Delta\xi_L) y_{\eta,e} + \Delta\xi_L y_{\eta,w} \right] - \frac{1}{2} \left[ (2 - \Delta\xi_L) x_{\eta,e} + \Delta\xi_L x_{\eta,w} \right] y_{\xi,P} \right\}\tag{5.54}$$

Observa-se que se  $x_{\eta,e} = x_{\eta,w}$  e  $y_{\eta,e} = y_{\eta,w}$  existe proporcionalidade entre as áreas, o que é expresso pela Eq. (5.54), resultando

$$I_{CVL} = \Delta\xi_L I_P.\tag{5.55}$$

Substituindo a Eq. (5.54) na expressão da fração de líquido, Eq. (5.47), obtém-se uma equação de segundo grau para  $\Delta\xi_L$ , uma vez que a fração de líquido é calculada pelo balanço de energia no volume em mudança de fase.

Com o valor de  $\Delta\xi_L$ , pode-se determinar o valor da coordenada  $\xi$  da frente de mudança de fase no volume, isto é, o valor de  $\xi_f$ , como representado na figura 5.5.

O método admite um certo desalinhamento entre a interface e a malha. Estabeleceu-se um critério para o realinhamento da malha à posição da interface, utilizando o chamado "fator de desalinhamento", **FD**, que é a maior diferença entre os valores de  $\xi_f$  da coluna de volumes em mudança de fase. Expressa-se o fator de desalinhamento como

$$FD = \max (\Delta\xi_f^J),\tag{5.56}$$

onde o índice **J** representa que existe um valor de  $\xi_f$  para cada linha da malha e o fator de desalinhamento é calculado entre as linhas que apresentarem maior diferença de  $\xi_f$ .

Assim, quanto menor o desalinhamento admitido, melhor será a aproximação do cálculo da posição da interface, pois, para ele considerou-se a interface perfeitamente alinhada à malha. Em contrapartida, mais correções da malha serão necessárias, aumentando o tempo de processamento para a solução do problema. No capítulo 7, onde são apresentados resultados obtidos

com o novo método, estuda-se o efeito do valor do fator de desalinhamento **FD**, na qualidade da solução.

### 5.3.3- Cálculo da Malha

Nesta seção são apresentados detalhes do cálculo da nova malha nos dois casos de malha móvel utilizados.

#### Malha Coincidente com a Interface

No caso da malha coincidente com a interface, a dificuldade é de, conhecido o jacobiano do volume, isto é, a área do volume que mudou de fase, determinar a posição dos pontos da malha que coincide com a interface no instante atual. O jacobiano atual dos volumes em mudança de fase é calculado por meio do balanço de energia, como será mostrado na seção 5.4.2.

Com base na figura 5.6, verifica-se que a parte da malha que se encontra até a posição da interface no tempo anterior (FMF<sup>o</sup>) só se move uma vez para cada avanço de tempo, não necessitando ser convergida junto com a solução. A linha coincidente com a interface é ajustada por método iterativo, e as linhas após a interface são distribuídas de maneira geométrica, geralmente com espaçamento constante, sobre o restante do domínio.

A geração da malha parte de um dos pontos onde a interface encontra um contorno. Considerando a figura 5.6, a seguir, pode-se iniciar o processo do ponto "o", no qual a interface encontra a face norte do domínio. Então, a malha é gerada de cima para baixo, encontrando para cada volume em mudança de fase a posição do ponto "se", em função dos demais, "nw", "sw", "ne".

Os pontos dos vértices do volume P são relacionados pelo cálculo das derivadas que compõem o valor do jacobiano do volume,

$$\begin{aligned}
 x_{\eta,e} &= x_{ne} - x_{se} \\
 x_{\xi,s} &= x_{se} - x_{sw} \\
 y_{\eta,e} &= y_{ne} - y_{se} \\
 y_{\xi,s} &= y_{se} - y_{sw}
 \end{aligned}
 \tag{5.57}$$

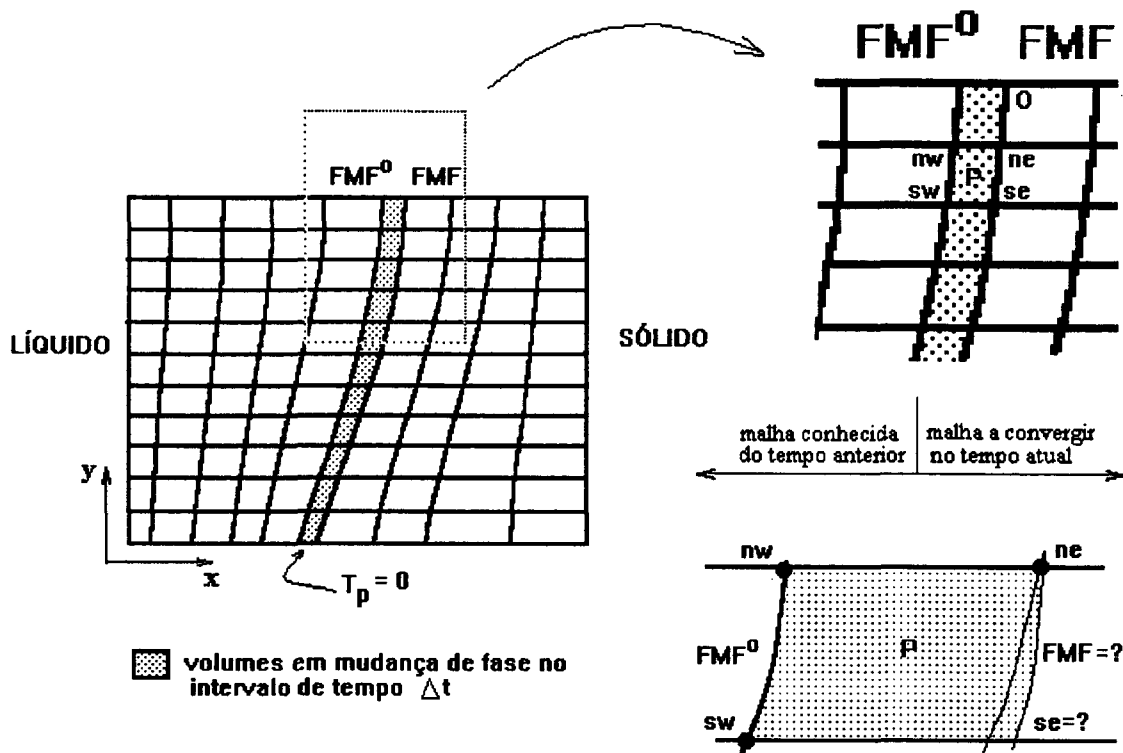


Fig. 5.6- Geração da malha coincidente com a interface

Para o cálculo do jacobiano no centro do volume P, tem-se

$$\begin{aligned} x_{\xi,P} &= \frac{x_{\xi,n} + x_{\xi,s}}{2}; & y_{\xi,P} &= \frac{y_{\xi,n} + y_{\xi,s}}{2} \\ x_{\eta,P} &= \frac{x_{\eta,e} + x_{\eta,w}}{2}; & y_{\eta,P} &= \frac{y_{\eta,e} + y_{\eta,w}}{2} \end{aligned} \quad (5.58)$$

Substituindo na expressão do inverso do jacobiano, obtém-se uma equação relacionando as coordenadas do ponto "se" com os demais pontos.

$$\frac{(x_{se} - x_{sw}) + x_{\xi,n}}{2} \cdot \frac{(y_{ne} - y_{se}) + y_{\eta,w}}{2} - \frac{(x_{ne} - x_{se}) + x_{\eta,w}}{2} \cdot \frac{(y_{se} - y_{sw}) + y_{\xi,n}}{2} = I_P \quad (5.59)$$

Agora, torna-se necessária a utilização de mais uma informação que relacione as coordenadas do ponto "se". Sendo a malha estruturada, pode-se determinar uma relação geométrica entre  $y_{se}$  e  $x_{se}$ ,

$$y_{se} = F(x_{se}) \quad (5.60)$$

onde  $F$  é a função geométrica da malha. Por exemplo, para uma malha como a representada na figura 5.6, existe um valor de  $y=\text{constante}$  para cada linha, assim, sabendo-se a linha do ponto a coordenada  $y$  é conhecida. Conclui-se que as equações (5.59) e (5.60) formam um sistema que permite o cálculo do valor de  $x_{se}$ , em função da posição dos demais pontos do volume.

Desta forma, todos os pontos da interface podem ser obtidos, em função do primeiro, por onde se iniciou o processo. No caso representado na figura 5.6, trata-se do ponto "o". Para que um erro na previsão da posição deste ponto tenha menor importância na solução, utiliza-se uma malha bem estreita junto à fronteira onde se encontra o ponto "o".

O procedimento iterativo para obtenção dos pontos da interface é, então, o seguinte,

1. Cálculo dos valores dos jacobianos inversos nos volumes em mudança de fase, por meio do balanço de energia.
2. Cálculo da nova posição do ponto de origem, "o", utilizando aproximação por série de Taylor de segunda ordem.
3. Cálculo da posição dos demais pontos da interface pelo sistema composto por (5.59) e (5.60).
4. Redistribuição dos pontos da malha após a interface.
5. Cálculo das novas métricas e de novo campo de temperaturas após a interface.
6. Retorna-se ao passo 1, calculando novos jacobianos, e assim sucessivamente até obter a convergência do processo.

### **Malha Ajustável**

Neste caso a primeira linha da malha após a interface é ajustada de tempos em tempos, a fim de ficar paralela a ela. As linhas anteriores à posição atual da interface não são ajustadas, ficando aproximadamente paralelas à interface quando esta passou por ali. Depois do alinhamento da primeira linha da malha após a interface, as demais linhas após esta são redistribuídas de forma uniforme no restante do domínio. Portanto, somente as malhas após a interface são adaptadas, diminuindo o trabalho computacional.

O alinhamento da malha à posição da interface é feito encontrando-se o ângulo de inclinação da interface com relação ao eixo  $y$ , por exemplo, e fazendo a primeira linha após a interface paralela a ela. Para tal, um dos extremos da linha deve ser fixado, denominado ponto "o" na figura 5.7, a partir do qual a malha será gerada. Os demais pontos são obtidos a partir deste primeiro, fixo, por meio do ângulo conhecido da interface. Com a primeira linha após a interface determinada, as demais são obtidas dividindo-se igualmente o domínio resultante.

A figura 5.7, a seguir, mostra como é feito o cálculo do ângulo da interface.

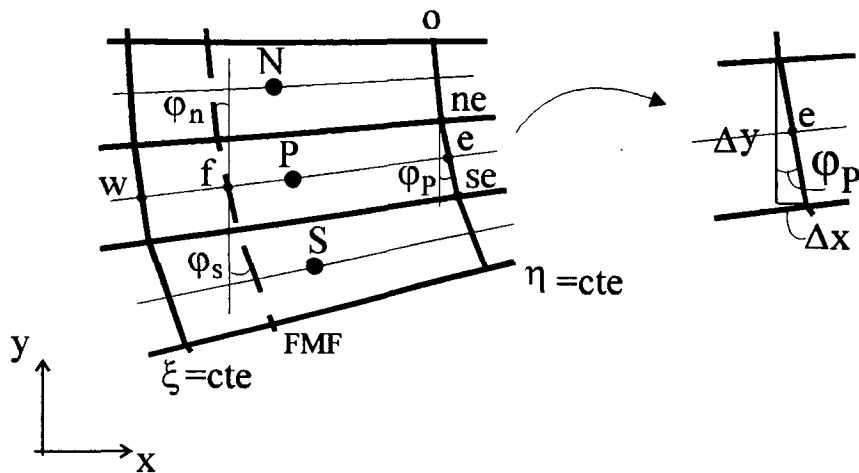


Fig. 5.7- Cálculo do ângulo da interface

Os ângulos da interface ao norte e ao sul no volume P são dados respectivamente por

$$\begin{aligned}\varphi_n &= \text{tg}^{-1} \left| \frac{x_{f,P} - x_{f,N}}{y_{f,P} - y_{f,N}} \right| \\ \varphi_s &= \text{tg}^{-1} \left| \frac{x_{f,P} - x_{f,S}}{y_{f,P} - y_{f,S}} \right|\end{aligned}\quad (5.61)$$

onde  $x_{f,P}$ ,  $y_{f,P}$  são as coordenadas do ponto f, que localiza a interface no volume P,  $x_{f,N}$ ,  $y_{f,N}$  e  $x_{f,S}$ ,  $y_{f,S}$  são as coordenadas do ponto f nos volumes N e S, respectivamente.

O ângulo médio no volume P, pelo qual a linha leste do volume será ajustada, é dado por

$$\varphi_P = \frac{\varphi_n + \varphi_s}{2} \quad (5.62)$$

Agora, partindo-se de um ponto de origem, ponto "o" na figura 5.7, os demais pontos da linha leste do volume em mudança de fase são obtidos fazendo-se,

$$\begin{aligned}x_{se} &= x_{ne} + \Delta x \\ y_{se} &= y_{ne} + \Delta y\end{aligned}\quad (5.63)$$

e, lembrando que

$$\operatorname{tg} \varphi_P = \frac{\Delta x}{\Delta y} \quad (5.64)$$

Para a determinação dos pontos da linha leste é ainda necessário conhecer a função geométrica da malha, ou seja, uma lei de formação que relaciona as coordenadas  $x$  e  $y$  dos pontos da malha.

O valor das coordenadas do ponto  $f$  é facilmente determinado a partir do valor da coordenada  $\xi$  da interface,  $\xi_f$ , cujo cálculo foi apresentado na seção anterior, com o auxílio da figura 5.5. A figura 5.8, a seguir, é coerente com aquela e ilustra a determinação das coordenadas de  $f$ , a partir do valor de  $\xi_f$ .

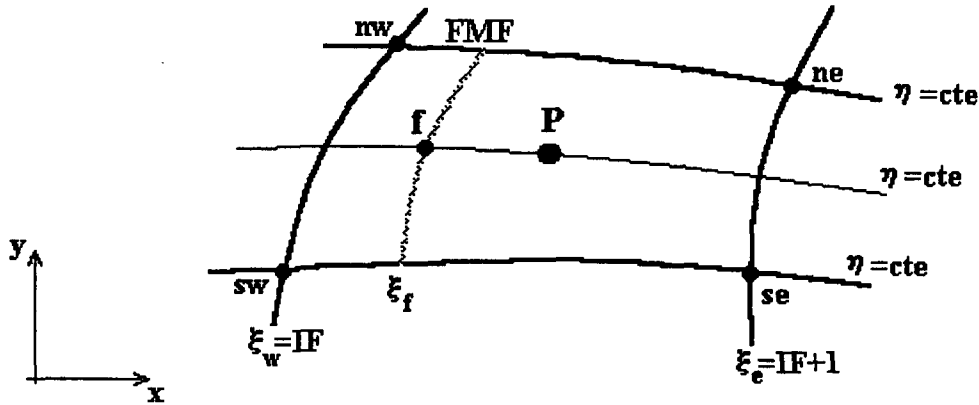


Fig. 5.8- Posição da interface no plano físico

Assim,

$$\begin{aligned} x_{f,P} &= \frac{x_{nw} + x_{sw}}{2} + x_{\xi,P} (\xi_{f,P} - IF) \\ y_{f,P} &= \frac{y_{nw} + y_{sw}}{2} + y_{\xi,P} (\xi_{f,P} - IF) \end{aligned} \quad (5.65)$$

Concluindo, descreve-se a sequência para determinação da malha ajustada à interface.

1. Pelo balanço de energia nos volumes em mudança de fase, obtém-se a fração de líquido em cada um deles.
2. Calcula-se a posição da interface a partir do valor da fração de líquido, como descrito na seção anterior, obtendo  $\xi_f$ , e usa-se (5.65)

para calcular as coordenadas no plano físico do ponto  $f$  em cada volume em mudança de fase.

3. Com a solução convergida, verifica-se o desalinhamento da malha. Se o fator de desalinhamento for maior que um valor admissível, a malha deve ser ajustada, caso contrário, esta continua fixa.
4. Para o cálculo da nova malha, calculam-se os ângulos da interface, como descrito nas equações (5.61) e (5.62).
5. Determinam-se os novos pontos a partir do ponto de origem, "o", usando-se as relações (5.63) e (5.64), além da função geométrica da malha.

## 5.4 - DETALHES DO NOVO MÉTODO

### 5.4.1- A Discretização dos Termos

No capítulo 4 o novo método para a situação unidimensional foi apresentado, mostrando a clara vantagem de se calcular os fluxos de calor nas faces dos volumes em mudança de fase com relação à posição da interface. Concluiu-se que esta aproximação praticamente elimina as oscilações nas curvas de temperatura, e permite um cálculo mais preciso da posição da interface.

A generalização do método unidimensional é simplificada considerando-se a interface praticamente paralela às linhas  $\xi = \text{constante}$ . Com a utilização de coordenadas generalizadas e malha móvel, não é difícil obter este alinhamento. Com esta suposição, pode-se facilmente obter um valor para a coordenada  $\xi$  na interface,  $\xi_f$ , como mostrado na seção 5.3.2.

Como será mostrado na seção a seguir, onde são analisados todos os termos do balanço energético no volume em mudança de fase, as derivadas, sempre que possível, são aproximadas levando em consideração a posição da interface e o fato de sua temperatura  $T_f$ , ser igual a zero.

Porém, no caso de se utilizar a malha coincidente com a interface, os fluxos de calor nas faces dos volumes em mudança de fase podem ser obtidos diretamente das diferenças de temperatura nos centros dos volumes. Neste caso a temperatura nos volumes em mudança de fase é realmente o valor de referência, nulo, uma vez que neles existe apenas o material que muda de fase no intervalo de tempo atual. Assim sendo, utilizam-se as chamadas "diferenças centrais simples - d.c.s." para a discretização dos fluxos no método com a malha coincidente com a interface, assim como é feito no método de Voller.

A equação de conservação da energia em coordenadas generalizadas, Eq. (5.26), foi apresentada na seção 5.2.3. Integrando-a num volume infinitesimal e no tempo, para obter a discretização em volumes finitos [110], obtém-se

$$\begin{aligned} & \left[ \rho \frac{T_P}{J_P} - \rho^0 \frac{T_P^0}{J_P^0} \right] \frac{\Delta V}{\Delta \tau} + \left[ \rho \tilde{U}T - C_1^T \frac{\partial T}{\partial \xi} - C_2^T \frac{\partial T}{\partial \eta} \right]_e - \left[ \rho \tilde{U}T - C_1^T \frac{\partial T}{\partial \xi} - C_2^T \frac{\partial T}{\partial \eta} \right]_w + \\ & + \left[ \rho \tilde{V}T - C_3^T \frac{\partial T}{\partial \eta} - C_2^T \frac{\partial T}{\partial \xi} \right]_n - \left[ \rho \tilde{V}T - C_3^T \frac{\partial T}{\partial \eta} - C_2^T \frac{\partial T}{\partial \xi} \right]_s = [\bar{S} - \bar{S}^0] \frac{\Delta V}{\Delta \tau} \end{aligned} \quad (5.66)$$

A obtenção dos coeficientes da equação discretizada, utilizando diferenças centrais simples para o cálculo dos fluxos nas faces é apresentada no capítulo 6, onde são tratados detalhes a respeito do método numérico utilizado.

A seguir será feita uma análise do uso da equação da energia na forma de balanço num volume em mudança de fase. Os métodos novos e o método de Voller serão comparados detalhadamente, analisando-se a aproximação e a importância de cada termo do balanço.

Posteriormente, na seção 5.4.3 estuda-se como se aplica a condição de não escorregamento na interface para o escoamento no líquido, e na seção seguinte, 5.4.4, é feita uma análise da discretização das derivadas que compõem os fluxos difusivos junto à interface.

#### 5.4.2- Análise do Balanço de Energia num Volume em MDF

Os novos métodos propostos, assim como o método de Voller, não utilizam a equação da energia para calcular a temperatura nos volumes em mudança de fase. No novo método com malha ajustável, a temperatura no centro dos volumes em mudança de fase é obtida por interpolação linear com relação aos vizinhos. Já no método com malha coincidente com a interface, assim como no método de Voller, a temperatura é feita nula nos volumes em mudança de fase.

A equação de conservação da energia integrada no volume e no tempo, como apresentada na Eq. (5.66), sugere um balanço de energia para o volume em mudança de fase, cujos termos podem ser denominados por:



$$\text{VAR} = \left[ \rho \frac{T_P}{J_P} - \rho^0 \frac{T_P^0}{J_P^0} \right] \frac{\Delta V}{\Delta \tau} \quad (5.67)$$

$$\text{FLUE} = \left[ \rho \tilde{U}T - C_1^T \frac{\partial T}{\partial \xi} - C_2^T \frac{\partial T}{\partial \eta} \right]_e \quad (5.68)$$

$$\text{FLUW} = \left[ \rho \tilde{U}T - C_1^T \frac{\partial T}{\partial \xi} - C_2^T \frac{\partial T}{\partial \eta} \right]_w \quad (5.69)$$

$$\text{FLUN} = \left[ \rho \tilde{V}T - C_3^T \frac{\partial T}{\partial \eta} - C_2^T \frac{\partial T}{\partial \xi} \right]_n \quad (5.70)$$

$$\text{FLUS} = \left[ \rho \tilde{V}T - C_3^T \frac{\partial T}{\partial \eta} - C_2^T \frac{\partial T}{\partial \xi} \right]_s \quad (5.71)$$

$$\text{ST} = B[f_P^0 - f_P] \frac{\Delta V}{\Delta \tau} \quad (5.72)$$

onde o primeiro termo é a variação da energia sensível no volume, os quatro seguintes são os fluxos nas faces e o último representa a variação de energia latente no volume em mudança de fase.

O balanço de energia no volume em mudança de fase, então, fica:

$$\text{VAR} + \text{FLUE} - \text{FLUW} + \text{FLUN} - \text{FLUS} = \text{ST} \quad (5.73)$$

A seguir serão detalhadas as particularidades do balanço de energia nos volumes em mudança de fase para os diversos métodos.

### **Método de Voller**

Segundo o trabalho de Voller [89], a correção da fração de líquido é dada por

$$f_P^{k+1} = f_P^k + \frac{a_P h_P}{\rho \lambda} \quad (5.74)$$

Como se está trabalhando com a temperatura como variável dependente, reescreve-se esta expressão alterando-se os coeficientes,

$$f_P^{k+1} = f_P^k + \frac{A_P T_P}{B} \quad (5.75)$$

Esta correção é obtida da seguinte maneira. Partindo-se da equação da energia discretizada, no nível iterativo  $k$ , tem-se

$$(A_P T_P)^k = A_P^0 T_P^0 - (\sum A_{nb} T_{NB})^k + B(f_P^0 - f_P^k) \quad (5.76)$$

Num nível iterativo  $k+1$ , a temperatura  $T_P$ , num volume em mudança de fase deveria ser nula. Então, calcula-se a correção de  $f_P^k$  para que isto aconteça. Assim,

$$0 = A_P^0 T_P^0 - (\sum A_{nb} T_{NB})^{k+1} + B(f_P^0 - f_P^{k+1}) \quad (5.77)$$

Subtraindo a Eq. (5.77) da Eq. (5.76), obtém-se

$$f_P^{k+1} = f_P^k + \frac{(A_P T_P)^k}{B}, \quad (5.78)$$

que é correspondente à Eq. (5.75). Na subtração das equações, considerou-se que  $(A_{nb} T_{NB})^{k+1} = (A_{nb} T_{NB})^k$ , o que realmente ocorre, uma vez que os coeficientes são constantes e o perfil de temperatura também, pois a temperatura no volume em mudança de fase é feita nula.

Agora, substituindo na Eq. (5.78) o valor de  $(A_P T_P)^k$  da Eq. (5.76), conclui-se que a correção pode ser dada a partir do valor do tempo anterior, ficando

$$f_P^{k+1} = f_P^0 + \frac{1}{B} [A_P^0 T_P^0 - (\sum A_{nb} T_{NB})^k]. \quad (5.79)$$

Pode-se facilmente mostrar que esta correção corresponde ao balanço de energia no volume em mudança de fase, ficando

$$f_P^{k+1} = f_P^0 - \frac{1}{B} (\text{VAR} + \text{FLUE} - \text{FLUW} + \text{FLUN} - \text{FLUS})^k = f_P^0 - \frac{\text{STB}^k}{B}, \quad (5.80)$$

onde  $\text{STB}^k$  é o resultado do lado esquerdo do balanço no nível iterativo  $k$ .

Para o método de Voller, todos os fluxos são calculados por diferenças centrais simples, e a temperatura no volume em mudança de fase é feita igual a um valor muito pequeno, numericamente, somando um valor muito grande ao coeficiente  $A_P$  para os volumes em que  $0 < f_P < 1$ .

Após a correção da fração de líquido, tem-se um dos três casos seguintes:

1. )  $0 < f_P^{k+1} < 1$  - significando que o volume continua em mudança de fase, então,  $T_P = 0$ .
2. )  $f_P^{k+1} < 0$  - que corresponde, numa solidificação, à interface passando para o próximo volume. O método faz, neste caso,  $f_P^{k+1} = 0$ .
3. )  $f_P^{k+1} > 1$  - que corresponde, numa solidificação, à interface voltando ao volume anterior. O método faz  $f_P^{k+1} = 1$ .

Conclui-se que nos casos 2) e 3) deixa de existir um volume em mudança de fase na linha em questão e, conseqüentemente, perde-se a referência de um volume com  $T_P = 0$  nesta linha da malha. A interface pode ficar mais de um avanço de tempo "perdida" entre dois volumes de uma linha, um deles totalmente sólido e outro totalmente líquido.

Analizando um caso onde todo o domínio continha líquido à temperatura de mudança de fase ( $T_f = 0$ ), e ocorre uma solidificação a partir de alguma fronteira, verifica-se que a situação descrita anteriormente permite que todo o domínio fique a uma temperatura negativa. Do ponto de vista de balanço energético, isto significa que foi retirado calor de todo o domínio, baixando a sua temperatura. No cômputo global, esta energia espúria possui pequena representatividade. Porém, do ponto de vista físico, este resultado indicaria que todo o domínio estaria no estado sólido, uma vez que sua temperatura ficou inferior à de mudança de fase. Nos métodos propostos neste trabalho este tipo de problema não ocorre.

### **Método com Malha Coincidente com a Interface**

Este método se assemelha ao método de Voller, mas a malha móvel coincidente com a interface permite que se delimitem exatamente os volume em mudança de fase, nos quais a temperatura será nula. Estes volumes encontram-se entre linhas da malha que coincidem com a posição da interface no instante anterior (FMF<sup>o</sup>), e a interface no instante atual (FMF).

O termo-fonte do balanço de energia para estes volumes em mudança de fase corresponde à quantidade de energia latente consumida na mudança de fase, e é dada por

$$ST = \frac{\rho\lambda}{J_P} \frac{\Delta V}{\Delta \tau} \quad (5.81)$$

Dessa maneira, o balanço de energia é usado para calcular o novo jacobiano do volume em mudança de fase. Lembrando que  $STB^k$  é o resultado do lado esquerdo do balanço de energia, dado pela Eq. (5.73), no nível iterativo  $k$ , tem-se

$$J_P^k = \frac{\rho\lambda}{\Delta \tau} \frac{1}{STB^k} \quad (5.82)$$

Este valor do jacobiano é usado para calcular a posição da interface, ou seja, da linha da malha que coincide com ela.

### **Método com Malha Ajustável**

Este método utiliza a equação de conservação da energia nos volumes em mudança de fase (mdf) para calcular a correção da fração de líquido no volume, como no método de Voller. Difere deste principalmente por não fazer  $T_P=0$  nos volumes em mdf e por tratar de maneira especial as derivadas junto à frente de mdf, levando em consideração a sua posição e o fato de sua temperatura ser conhecida.

O valor da temperatura nos volumes em mdf não é obtido pela solução da equação da energia, como nos demais volumes. É calculado por interpolação linear com relação à posição da interface, podendo ser

**a) somente na direção  $\xi$**

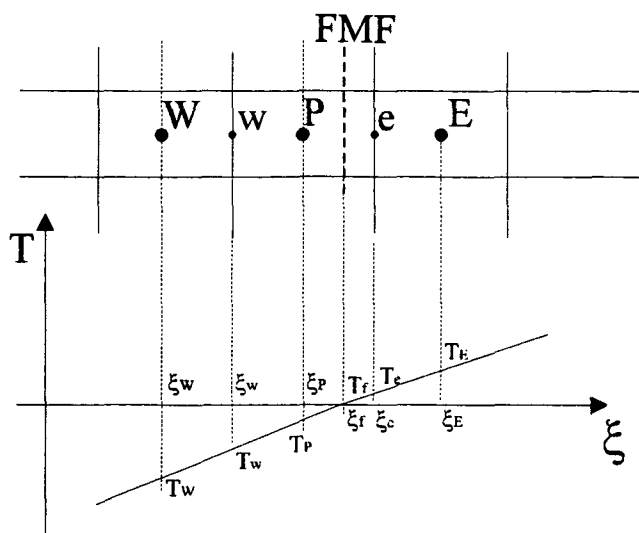


Fig. 5.9- Cálculo da temperatura no ponto em mdf

De acordo com a figura 5.9, tem-se

$$\text{Se } \xi_f < \xi_P \Rightarrow T_P = \frac{\xi_P - \xi_f}{\xi_E - \xi_f} T_E, \quad (5.83)$$

$$\text{Se } \xi_f \geq \xi_P \Rightarrow T_P = \frac{\xi_f - \xi_P}{\xi_f - \xi_W} T_W$$

**b) nas duas direções**

$$\text{Se } \xi_f < \xi_P \Rightarrow T_P = \frac{1}{2} \left( \frac{\xi_P - \xi_f}{\xi_E - \xi_f} T_E + \frac{T_N + T_S}{2} \right), \quad (5.84)$$

$$\text{Se } \xi_f \geq \xi_P \Rightarrow T_P = \frac{1}{2} \left( \frac{\xi_f - \xi_P}{\xi_f - \xi_W} T_W + \frac{T_N + T_S}{2} \right).$$

Estuda-se, a seguir, como são aproximados os termos para o cálculo do balanço no volume em mdf. O balanço é usado para corrigir a fração de líquido, exatamente como feito no método de Voller, na Eq. (5.80), porém, a maneira de calcular cada um dos termos é diferente.

## 1) VAR - Variação de energia sensível no volume

No método dos volumes finitos, a variável armazenada no centro do volume representa um valor médio integrado em todo o volume. No caso da temperatura no volume em mdv isto não ocorre, pois utiliza-se um valor pontual, interpolado com relação aos vizinhos. Por isso, para o cálculo de VAR, necessita-se calcular uma temperatura média integrada no volume, ao invés de se usar a temperatura  $T_P$ , como previsto na Eq. (5.67). Semelhantemente ao que se fez para o caso unidimensional, obtém-se o valor das temperaturas nas faces,  $T_w$  e  $T_e$ , com relação à posição da interface e às temperaturas dos pontos vizinhos, ver Fig. 5.9. Assim,

$$\begin{aligned} T_w &= \frac{\xi_f - \xi_w}{\xi_f - \xi_W} T_W, \\ T_e &= \frac{\xi_e - \xi_f}{\xi_E - \xi_f} T_E \end{aligned} \quad (5.85)$$

Então, o volume P é dividido em dois, um antes da interface, outro depois, tal que a soma dos inversos dos jacobianos representa o inverso do jacobiano do volume todo, como representado na figura 5.10.

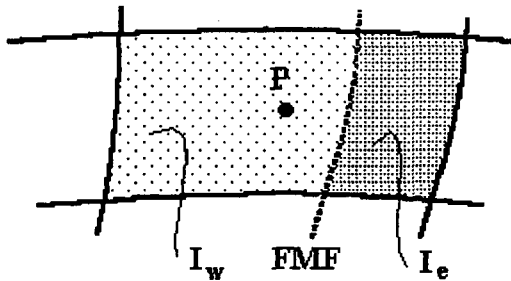


Fig. 5.10- Áreas do volume em mdv

Logo,

$$I_P = I_w + I_e \quad (5.86)$$

A temperatura média em cada um dos subvolumes é dada por

$$\bar{T}_w = \frac{T_w}{2}, \quad \bar{T}_e = \frac{T_e}{2} \quad (5.87)$$

Conclui-se que a temperatura média no volume resulta

$$\bar{T}_P = [I_w \bar{T}_w + I_e \bar{T}_e] / I_P \quad (5.88)$$

Agora, considerando o volume “w” sólido e o “e” líquido, pode-se dizer que

$$I_e / I_P = f_P \quad \text{e} \quad I_w / I_P = (1 - f_P), \quad (5.89)$$

A temperatura média no volume, então, resulta

$$\bar{T}_P = (1 - f_P) \frac{\xi_f - \xi_w}{\xi_f - \xi_w} \frac{T_w}{2} + f_P \frac{\xi_e - \xi_f}{\xi_e - \xi_f} \frac{T_e}{2} \quad (5.90)$$

Com esta temperatura, representativa de todo o volume, obtém-se a energia sensível contida no mesmo

$$E_P = \rho c \bar{T}_P \frac{\Delta V}{J_P}, \quad (5.91)$$

com sua variação dada por

$$\text{VAR} = \left[ \rho c \frac{\bar{T}_P}{J_P} - \rho^0 c \frac{\bar{T}_P^0}{J_P^0} \right] \frac{\Delta V}{\Delta \tau} \quad (5.92)$$

A variação da energia sensível, VAR, é sempre negativa numa solidificação e positiva numa fusão. Em ambos os casos, verifica-se que a inclusão do valor de VAR no balanço de energia é importante para impedir uma aceleração numérica da interface, como ocorre no método de Voller, no qual este termo é desprezado quando se faz  $T_P=0$  no volume em mdF.

## 2) FLUW, FLUE - Fluxos de energia nas faces oeste e leste

Estes fluxos são os mais importantes para o deslocamento da interface, pois cruzam as faces aproximadamente paralelas a ela. São compostos de fluxo convectivo e fluxo difusivo. O fluxo difusivo apresenta duas derivadas, uma direta, outra cruzada. A seguir, estuda-se cada uma destas derivadas, usando as denominações apresentadas na figura 5.11, que servirá de base para a melhor compreensão destas e das demais derivadas estudadas.

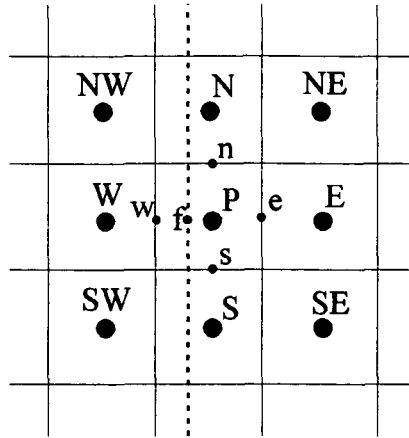


Fig. 5.11- Volumes da malha com convenção de denominações

A derivada direta  $\left. \frac{\partial T}{\partial \xi} \right)_{w,e}$

É a mais importante derivada para o movimento da interface quando a malha é ortogonal ou pouco não ortogonal (pequenos  $\beta$ ).

A sua discretização pode ser feita

a) por diferenças centrais simples, como nos métodos precedentes

$$\left. \frac{\partial T}{\partial \xi} \right)_w = \frac{T_P - T_W}{\Delta \xi}, \quad \left. \frac{\partial T}{\partial \xi} \right)_e = \frac{T_E - T_P}{\Delta \xi} \quad (5.93)$$

b) com relação à interface

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial T}{\partial \xi} \right)_w &= \frac{-T_W}{\xi_f - \xi_w} \\ \left. \frac{\partial T}{\partial \xi} \right)_e &= \frac{T_E}{\xi_E - \xi_f} \end{aligned} \quad (5.94)$$

A derivada cruzada  $\left. \frac{\partial T}{\partial \eta} \right)_{w,e}$

Está associada ao não paralelismo da interface com relação às linhas  $\xi$ =constante. Sendo a frente de mudança de fase uma isoterma, caso ela



estivesse paralela às linhas  $\xi=\text{cte}$  e os fluxos fossem predominantemente difusivos, as demais linhas  $\xi=\text{cte}$  próximas à interface seriam também isotermas, resultando derivadas cruzadas nulas.

Estas derivadas são dadas por

$$\left(\frac{\partial T}{\partial \eta}\right)_w = \frac{T_{w,N} - T_{w,S}}{2\Delta\eta}, \quad \left(\frac{\partial T}{\partial \eta}\right)_e = \frac{T_{e,N} - T_{e,S}}{2\Delta\eta} \quad (5.95)$$

A avaliação das temperaturas nas faces dos volumes N e S pode ser feita por

a) média simples

$$T_{w,N} = (T_N + T_{NW})/2; \quad T_{w,S} = (T_S + T_{SW})/2 \quad (5.96)$$

cuja derivada resulta, então,

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial T}{\partial \eta}\right)_w &= \frac{T_N + T_{NW} - T_S - T_{SW}}{4\Delta\eta}, \\ \left(\frac{\partial T}{\partial \eta}\right)_e &= \frac{T_N + T_{NE} - T_S - T_{SE}}{4\Delta\eta} \end{aligned} \quad (5.97)$$

b) interpolação linear considerando a posição da interface

$$\begin{aligned} T_{w,N} &= \frac{\xi_{f,N} - \xi_w}{\xi_{f,N} - \xi_w} T_{NW}, & T_{w,S} &= \frac{\xi_{f,S} - \xi_w}{\xi_{f,S} - \xi_w} T_{SW}, \\ T_{e,N} &= \frac{\xi_e - \xi_{f,N}}{\xi_e - \xi_{f,N}} T_{NE}, & T_{e,S} &= \frac{\xi_e - \xi_{f,S}}{\xi_e - \xi_{f,S}} T_{SE}, \end{aligned} \quad (5.98)$$

com a derivada resultando em

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial T}{\partial \eta}\right)_w &= \frac{1}{\Delta\eta} \left( \frac{\xi_{f,N} - \xi_w}{\xi_{f,N} - \xi_w} \frac{T_{NW}}{2} - \frac{\xi_{f,S} - \xi_w}{\xi_{f,S} - \xi_w} \frac{T_{SW}}{2} \right), \\ \left(\frac{\partial T}{\partial \eta}\right)_e &= \frac{1}{\Delta\eta} \left( \frac{\xi_e - \xi_{f,N}}{\xi_e - \xi_{f,N}} \frac{T_{NE}}{2} - \frac{\xi_e - \xi_{f,S}}{\xi_e - \xi_{f,S}} \frac{T_{SE}}{2} \right). \end{aligned} \quad (5.99)$$

### 3) FLUN, FLUS - Fluxos de energia nas faces norte e sul

Estes fluxos, quando predominantemente difusivos, são secundários onde a malha é quase ortogonal (pequenos  $\beta \Rightarrow C2 \sim 0$ ), no caso da interface quase paralela a linha  $\xi=\text{constante}$ . No caso de não ortogonalidade forte, a boa avaliação da derivada cruzada é essencial para prever bem o movimento da

interface. São também compostos de derivadas diretas e cruzadas nas parcelas difusivas, além do termo convectivo.

$$\text{A derivada direta } \left. \frac{\partial T}{\partial \eta} \right)_{s,n}$$

A importância desta derivada está na suavização da forma da interface. A sua avaliação é feita por diferenças centrais simples

$$\left. \frac{\partial T}{\partial \eta} \right)_n = \frac{T_N - T_P}{\Delta \eta}, \quad \left. \frac{\partial T}{\partial \eta} \right)_s = \frac{T_P - T_S}{\Delta \eta} \quad (5.100)$$

$$\text{A derivada cruzada } \left. \frac{\partial T}{\partial \xi} \right)_{s,n}$$

Este termo contabiliza um fluxo importante quando a malha é não ortogonal. Pode ser avaliado por

a) diferenças centrais e média aritmética

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial T}{\partial \xi} \right)_s &= \frac{T_{s,E} - T_{s,W}}{2\Delta \xi} = \frac{T_E + T_{SE} - T_W - T_{SW}}{4\Delta \xi}, \\ \left. \frac{\partial T}{\partial \xi} \right)_n &= \frac{T_{n,E} - T_{n,W}}{2\Delta \xi} = \frac{T_E + T_{NE} - T_W - T_{NW}}{4\Delta \xi} \end{aligned} \quad (5.101)$$

b) ponderação de derivadas antes e após a interface

$$\left. \frac{\partial T}{\partial \xi} \right)_s = \frac{1}{\Delta \xi} \left[ (\xi_{f,s} - \xi_w) \frac{-T_{s,W}}{\xi_{f,s} - \xi_w} + (\xi_e - \xi_{f,s}) \frac{T_{s,E}}{\xi_E - \xi_{f,s}} \right] \quad (5.102)$$

e ainda usando média aritmética para calcular as temperaturas nas faces “s” e “n”, cujas derivadas, então, ficam

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial T}{\partial \xi} \right)_s &= \left[ -\frac{(\xi_{f,s} - \xi_w)(T_{SW} + T_W)}{\xi_{f,s} - \xi_w} + \frac{(\xi_e - \xi_{f,s})(T_{SE} + T_E)}{\xi_E - \xi_{f,s}} \right] \frac{1}{\Delta \xi} \\ \left. \frac{\partial T}{\partial \xi} \right)_n &= \left[ -\frac{(\xi_{f,n} - \xi_w)(T_{NW} + T_W)}{\xi_{f,n} - \xi_w} + \frac{(\xi_e - \xi_{f,n})(T_{NE} + T_E)}{\xi_E - \xi_{f,n}} \right] \frac{1}{\Delta \xi} \end{aligned} \quad (5.103)$$

O valor de  $\xi_f$  avaliado nas faces norte e sul, é obtido por média. Assim

$$\xi_{f,s} = \frac{\xi_{f,S} + \xi_{f,P}}{2}, \quad \xi_{f,n} = \frac{\xi_{f,N} + \xi_{f,P}}{2} \quad (5.104)$$

Cabe ainda mostrar que para  $\xi_{f,s} = \xi_{f,n} = \xi_P$ , isto é, quando a interface é paralela a  $\xi = \text{cte}$  e se encontra no meio do volume, a expressão da Eq. (5.103) recai na obtida por diferenças centrais, Eq. (5.101).

#### 5.4.3- A Condição de Contorno na Interface Sólido/Líquido

A solução do escoamento no domínio líquido requer a aplicação de condições de contorno nas fronteiras do domínio. Como é sabido, em problema com mudança de fase, a cavidade líquida é móvel, sendo delimitada pela interface, cuja posição é função da solução do problema em cada tempo. Para os métodos de formulação em entalpia, ou métodos de formulação em um domínio, como é o caso do método de Voller [89], existe a necessidade de um recurso numérico para diferenciar o domínio líquido do sólido, no qual a velocidade deve ser nula. Alguns destes métodos para controle da velocidade foram apresentados na seção 2.4.

Quando se conhece a posição da interface, como é o caso do novo método, por isso chamado “método em um domínio com acompanhamento da frente” (*“front-tracking one-domain method”*), fica mais fácil a aplicação da condição de contorno na interface e a diferenciação entre os dois domínios. Neste caso, evita-se a solução das equações do movimento nos volumes no estado sólido, o que economiza esforços computacionais.

A condição de contorno para a convecção no líquido é de não escorregamento na interface, uma vez que ela representa uma das fronteiras do domínio. Porém, como a interface se move com uma velocidade  $\vec{V}_f = u_f \vec{i} + v_f \vec{j}$ , a condição de contorno impõe que

$$\begin{aligned} u)_{\xi=\xi_f} &= u_f \\ v)_{\xi=\xi_f} &= v_f \end{aligned} \quad (5.105)$$

Analisa-se a seguir como fica esta condição para os dois tipos de malha móvel.

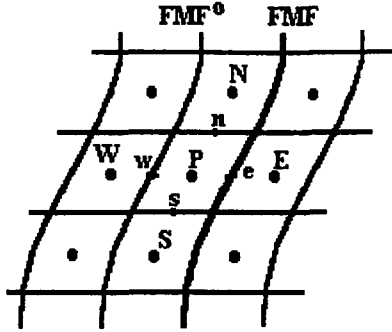
**Malha coincidente com a interface**

Fig. 5.12- Malha coincidente com a interface

Neste caso,

$$\begin{aligned}
 u_e = u_f &= \frac{x_e - x_e^0}{\Delta t} = \frac{x_e - x_w}{\Delta t} \\
 v_e = v_f &= \frac{y_e - y_e^0}{\Delta t} = \frac{y_e - y_w}{\Delta t}
 \end{aligned}
 \tag{5.106}$$

A velocidade relativa transformada na face leste (interface), que, como mostrado na seção 5.3.1, carrega o fluxo através desta, é dada por

$$\tilde{U}_e = U_e - U_{M,e} \tag{5.38}$$

com

$$U_e = y_{\eta,e} u_e - x_{\eta,e} v_e \tag{5.36}$$

e, como mostrado na seção 5.3.1, para haver conservação da massa com o movimento da malha, a velocidade contravariante da malha deve ser calculada como

$$U_{M,e} = y_{\eta,e}^{(1/2)} x_{\tau,e} - x_{\eta,e}^{(1/2)} y_{\tau,e} \tag{5.42}$$

Observando a condição de contorno, Eq. (5.106), observa-se que a velocidade na face leste é a própria velocidade da malha, dada por

$$\begin{aligned} u_e &= x_{\tau,e} \\ v_e &= y_{\tau,e} \end{aligned} \quad (5.107)$$

Como esperado, o fluxo de massa através da interface é nulo, ou,

$$\tilde{U}_e = 0 \quad (5.108)$$

o que ocorre se no cálculo da velocidade contravariante, Eq. (5.36), forem usadas as mesmas derivadas médias usadas na velocidade da malha para satisfazer a conservação geométrica.

Assim, calcula-se

$$U_e = y_{\eta,e}^{(1/2)} u_e - x_{\eta,e}^{(1/2)} v_e \quad (5.109)$$

lembrando que

$$\begin{aligned} y_{\eta,e}^{(1/2)} &= \frac{y_{\eta,e} + y_{\eta,e}^0}{2} \\ x_{\eta,e}^{(1/2)} &= \frac{x_{\eta,e} + x_{\eta,e}^0}{2} \end{aligned} \quad (5.110)$$

### **Malha Ajustável**

No caso da malha se mover de tempos em tempos, sem a coincidência de uma linha coordenada com a interface, não se pode mais afirmar que  $\tilde{U}_f = 0$ . Agora a identidade da Eq. (5.107) não é mais válida, e, portanto, a velocidade contravariante relativa deve ser calculada usando as equações (5.38), (5.42), (5.109) e (5.110). Para relacionar as velocidades cartesianas na face do volume em mudança de fase com as velocidades na interface, têm-se duas situações, representadas na figura 5.13.

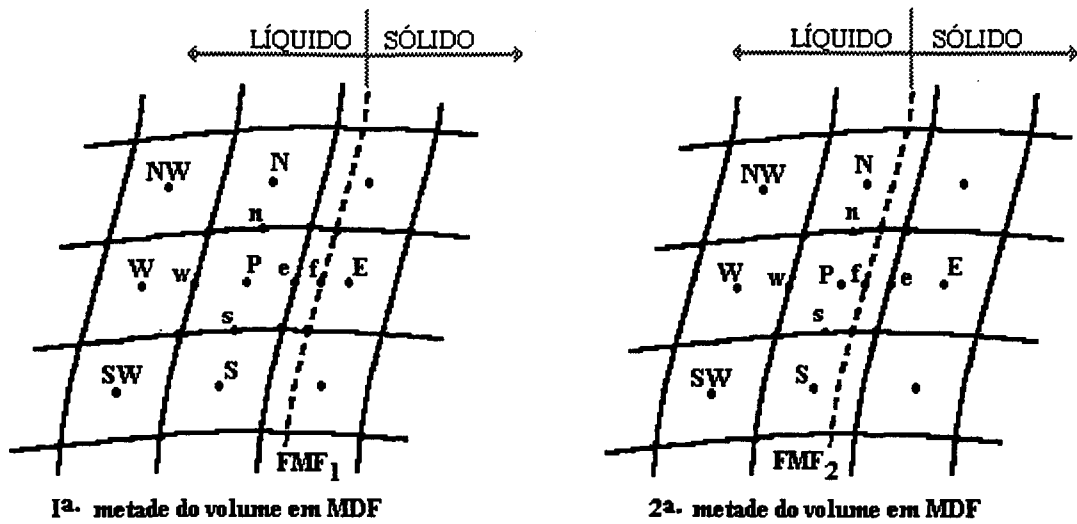


Fig. 5.13- Posições da interface na malha ajustável

No primeiro caso, a interface se encontra na primeira metade do volume,  $FMF_1$ , e a velocidade no ponto E, no centro do volume em mudança de fase é nula, considerando-se uma fusão da esquerda para a direita. Então, as equações de movimento não são resolvidas neste volume, e as velocidades cartesianas na face leste do volume P, a oeste do volume em mudança de fase, são aproximadas por interpolação linear, como mostrado a seguir para a velocidade  $u$

$$u_e = u_f - \frac{(\xi_f - \xi_e)(u_f - u_P)}{\xi_f - \xi_P} = \frac{(\xi_f - \xi_e)u_P + u_f / 2}{\xi_f - \xi_P} \quad (5.111)$$

A velocidade da frente de mudança de fase é obtida simplesmente por

$$u_f = \frac{x_f - x_f^0}{\Delta t} ; \quad v_f = \frac{y_f - y_f^0}{\Delta t} \quad (5.112)$$

No segundo caso, quando a interface se encontra na segunda metade do volume P, passa-se a resolver as equações do movimento neste volume. As componentes cartesianas da velocidade na face leste são, então, nulas.

#### 5.4.4- Fluxos de Quantidade de Movimento Junto à Interface

Semelhante ao que foi feito para a equação da energia, os fluxos de quantidade de movimento são discretizados com relação à interface, cuja velocidade considera-se conhecida, mas, que na verdade, é função da solução do problema.

Os fluxos convectivos são do tipo  $\rho \tilde{U}\phi)_{e,w}; \rho \tilde{V}\phi)_{n,s}$ ; com  $\phi=u$ , ou  $\phi=v$ , dependendo se é a equação do movimento em x ou em y, respectivamente, que está sendo resolvida. A condição na interface, tratada na seção anterior, deve ser aplicada na aproximação do fluxo convectivo na interface.

Os fluxos difusivos apresentam derivadas diretas, do tipo  $\left. \frac{\partial \phi}{\partial \xi} \right)_{e,w}; \left. \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \right)_{n,s}$ , e derivadas cruzadas do tipo  $\left. \frac{\partial \phi}{\partial \xi} \right)_{n,s}; \left. \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \right)_{e,w}$ , que devem ser convenientemente aproximadas, levando em consideração a existência da interface. A seguir analisa-se como proceder para os dois tipos de malha móvel.

#### Malha coincidente com a interface

Como visto na seção anterior, não existe fluxo convectivo através da interface, pois  $\tilde{U}_e = 0$ . Considerando os valores  $\phi_e$  conhecidos, Eq. (5.106), as derivadas devem ser aproximadas levando este fato em consideração. Assim, tem-se

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial \xi} \right)_e = \frac{\phi_e - \phi_P}{\Delta \xi / 2} \quad (5.113)$$

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \right)_e = \frac{\phi_{e,N} - \phi_{e,S}}{2\Delta \eta} \quad (5.114)$$

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial \xi} \right)_n = \left( \frac{\phi_{e,N} + \phi_{e,P}}{2} - \frac{\phi_P + \phi_N + \phi_{NW} + \phi_W}{4} \right) \frac{1}{\Delta \xi} \quad (5.115)$$

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial \xi} \right)_s = \left( \frac{\phi_{e,S} + \phi_{e,P}}{2} - \frac{\phi_P + \phi_S + \phi_{SW} + \phi_W}{4} \right) \frac{1}{\Delta \xi} \quad (5.116)$$

As demais derivadas podem ser aproximadas por diferenças centrais simples, como apresentado no capítulo 6. Com estas expressões obtêm-se os coeficientes das equações do movimento para os volumes em mudança de fase.

### Malha Ajustável

Como exposto na seção anterior, existem duas situações a serem consideradas. Na primeira, a interface se encontra na primeira metade do volume em mudança de fase, e na outra, a interface está na segunda metade do volume, como mostrado na figura 5.14, na qual são apresentadas as convenções para os pontos envolvidos nos cálculos.

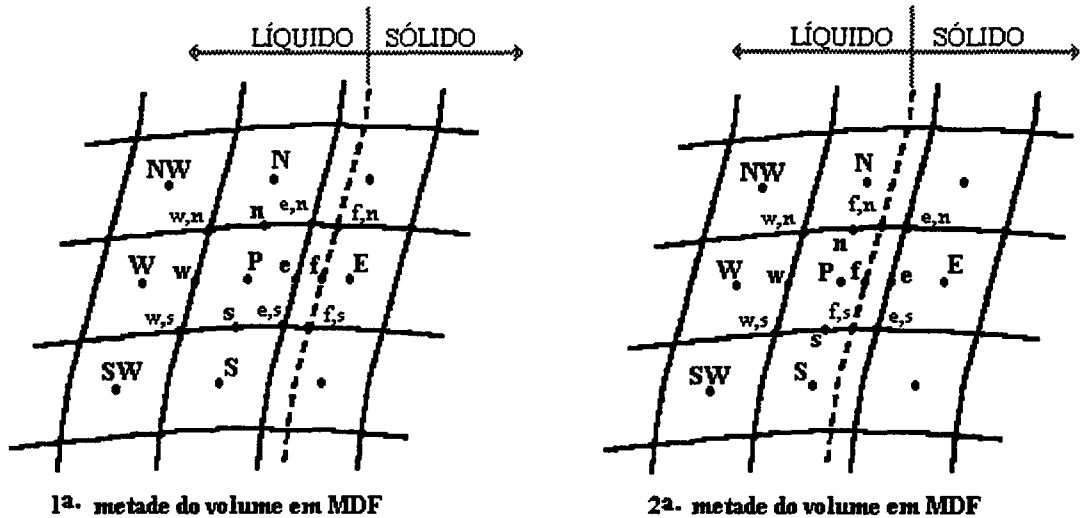


Fig. 5.14- Posição da interface na malha ajustável  
- Convenções

Quando a interface se encontra na primeira metade do volume em mudança de fase (volume E, conforme a figura 5.14), não se resolvem as equações de movimento neste volume, pois a maior parte do volume se encontra no estado sólido. Porém, na solução das equações do movimento para o volume vizinho, utiliza-se a informação da posição e da velocidade da interface. Assim sendo, as derivadas podem ser aproximadas por

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial \xi} \right)_e = \frac{\phi_f - \phi_P}{\xi_f - \xi_P} \quad (5.117)$$



$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \right|_e = \frac{\phi_{e,N} - \phi_{e,S}}{2\Delta\eta} \quad (5.118)$$

com as velocidades na face leste,  $\phi_e$ , obtidas por interpolação linear, levando em conta a posição e a velocidade da interface, como mostrado na seção anterior, Eq. (5.111),

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial \xi} \right|_n = \frac{\phi_{f,n} - \phi_{w,n}}{\xi_{f,n} - \xi_w} \quad (5.119)$$

com

$$\begin{aligned} \phi_{f,n} &= \frac{\phi_{f,N} + \phi_{f,P}}{2} ; \\ \xi_{f,n} &= \frac{\xi_{f,N} + \xi_{f,P}}{2} \end{aligned} \quad (5.120)$$

e

$$\phi_{w,n} = \frac{\phi_P + \phi_W + \phi_N + \phi_{NW}}{4} \quad (5.121)$$

De maneira similar,

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial \xi} \right|_s = \frac{\phi_{f,s} - \phi_{w,s}}{\xi_{f,s} - \xi_w} \quad (5.122)$$

No caso da interface passar pela metade do volume, passa-se a resolver as equações do movimento para este volume, P, como representado na figura 5.14. As velocidades cartesianas na face leste,  $\phi_e$ , são nulas por estarem no estado sólido, e as derivadas que compõem os fluxos difusivos são aproximadas usando as mesmas expressões apresentadas para o primeiro caso, Eqs. (5.117-5.122).

## CAPÍTULO 6

### DISCRETIZAÇÃO EM VOLUMES FINITOS

#### 6.1- LOCALIZAÇÃO DAS VARIÁVEIS NA MALHA

As duas maneiras básicas de dispor as variáveis dependentes na malha são a desencontrada e a colocalizada [110]. A Fig. 6.1 mostra como ficam estes arranjos para um ponto P da malha no plano transformado. Não se deve esquecer que, como ressaltado no capítulo 5, todos os trabalhos numéricos serão realizados no plano transformado

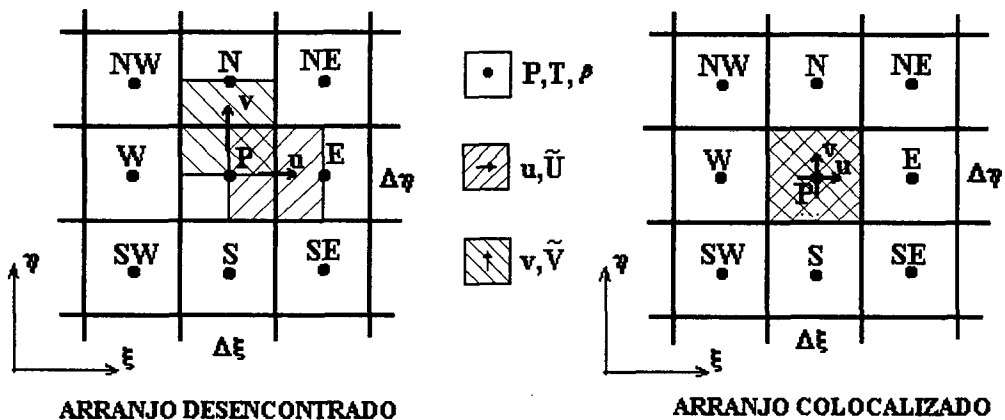


Fig. 6.1 - Arranjos desencontrado e colocalizado das variáveis na malha

O arranjo desencontrado possui três volumes elementares relativos ao ponto P, um para velocidade  $u$ , outro para velocidade  $v$ , e o volume centrado no ponto P para as demais variáveis do problema, como pressão, temperatura, entalpia. A principal vantagem deste arranjo é que as velocidades aparecem nas faces do volume de controle elementar, exatamente onde são necessárias para os balanços convectivos e também estando relacionadas ao gradiente de pressão entre dois pontos vizinhos. Porém, a utilização de três volumes desencontrados traz uma série de dificuldades adicionais ao código computacional propriamente dito e aumenta

sobremaneira o número de coeficientes a armazenar, tornando-se especialmente inconveniente em soluções tridimensionais.

Neste trabalho utiliza-se o arranjo colocalizado, pois se acredita ser este o mais atual devido ao advento de metodologias numéricas eficientes garantindo o seu bom desempenho em problemas compressíveis e incompressíveis. Após o trabalho de Peric et al. [119], uma série de estudos foram feitos [110,120,121] até se chegar a uma metodologia numérica confiável para utilização de malha colocalizada em problemas incompressíveis para os quais é imperativo o conveniente acoplamento entre pressão e velocidade. Este trabalho vai se basear totalmente nesta metodologia desenvolvida por Marchi e Maliska [121].

## 6.2- DISCRETIZAÇÃO DAS EQUAÇÕES

O método dos volumes finitos se baseia na integração das equações de conservação nos volumes elementares. Assim, o método garante a conservação das propriedades a nível dos volumes elementares, qualquer que seja o tamanho deste. Esta é uma importante característica do método, estando diretamente ligado à física do problema.

Matematicamente, o método dos volumes finitos nada mais é que um método de resíduos ponderados com a função peso igual à unidade [122]. Vários outros métodos de discretização originam-se do método de resíduos ponderados, porém, com diferentes valores da função peso. A função peso igual à unidade é particularmente interessante pois leva a equações discretas que são balanços de conservação sobre os volumes elementares.

Partindo da equação de conservação geral para uma variável genérica,  $\phi$ , transformada para as coordenadas generalizadas, Eq.(5.12), e transcrita abaixo, obtém-se a equação geral discretizada por meio da integração dos termos no volume elementar e no tempo, conforme será feito a seguir. A equação geral de conservação é dada por

$$\frac{\partial}{\partial \tau} \left( \frac{\rho \Phi}{J} \right) + \frac{\partial}{\partial \xi} (\rho \tilde{U} \Phi) + \frac{\partial}{\partial \eta} (\rho \tilde{V} \Phi) = \frac{\partial}{\partial \xi} \left( C_1^\Phi \frac{\partial \Phi}{\partial \xi} + C_2^\Phi \frac{\partial \Phi}{\partial \eta} \right) + \frac{\partial}{\partial \eta} \left( C_3^\Phi \frac{\partial \Phi}{\partial \eta} + C_2^\Phi \frac{\partial \Phi}{\partial \xi} \right) + \bar{S}^\Phi \quad (5.12)$$

onde as componentes contravariantes de vetor velocidade relativa são dadas por

$$\tilde{U} = y_{\eta}(u - x_{\tau}) - x_{\eta}(v - y_{\tau}) \quad (5.13)$$

$$\tilde{V} = x_{\xi}(v - y_{\tau}) - y_{\xi}(u - x_{\tau}) \quad (5.14)$$

e os coeficientes de transporte transformados ficam

$$C_1^{\Phi} = \Gamma^{\Phi} J \alpha \quad (5.15)$$

$$C_2^{\Phi} = -\Gamma^{\Phi} J \beta \quad (5.16)$$

$$C_3^{\Phi} = \Gamma^{\Phi} J \gamma, \quad (5.17)$$

onde  $J$  é o jacobiano da transformação e  $\alpha, \beta, \gamma$  são as componentes do tensor métrico, como mostrado em [110].

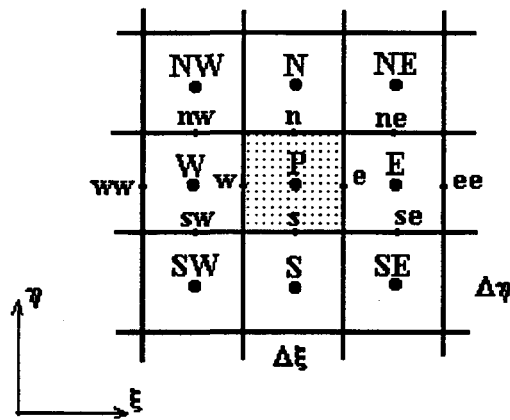


Fig. 6.2 - Volume de controle elementar no plano transformado

Integrando cada termo no volume elementar relativo ao ponto  $P$ , conforme mostrado na Fig. 6.2, e no tempo, obtém-se :

- termo transiente

$$\iint_{V_{\tau}} \frac{\partial}{\partial \tau} \left( \frac{\rho \phi}{J} \right) d\xi d\eta d\tau \cong \left[ \rho_P \frac{\phi_P^{n+1}}{J_P^{n+1}} - \rho_P \frac{\phi_P^n}{J_P^n} \right] \Delta\xi \Delta\eta \quad (6.1)$$

- termos convectivos

$$\begin{aligned} \iint_{V_\tau} \frac{\partial}{\partial \xi} (\rho \tilde{U} \phi) d\xi d\eta d\tau &\equiv \left[ (\rho \tilde{U} \phi)_e^{n+\theta} - (\rho \tilde{U} \phi)_w^{n+\theta} \right] \Delta\eta \Delta\tau \\ \iint_{V_\tau} \frac{\partial}{\partial \eta} (\rho \tilde{V} \phi) d\xi d\eta d\tau &\equiv \left[ (\rho \tilde{V} \phi)_n^{n+\theta} - (\rho \tilde{V} \phi)_s^{n+\theta} \right] \Delta\xi \Delta\tau \end{aligned} \quad (6.2)$$

- termos difusivos

$$\begin{aligned} \iint_{V_\tau} \frac{\partial}{\partial \xi} \left( C_1^\phi \frac{\partial \phi}{\partial \xi} + C_2^\phi \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \right) d\xi d\eta d\tau &\equiv \left[ \left( C_1^\phi \frac{\partial \phi}{\partial \xi} + C_2^\phi \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \right)_e^{n+\theta} - \left( C_1^\phi \frac{\partial \phi}{\partial \xi} + C_2^\phi \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \right)_w^{n+\theta} \right] \Delta\eta \Delta\tau \\ \iint_{V_\tau} \frac{\partial}{\partial \eta} \left( C_3^\phi \frac{\partial \phi}{\partial \eta} + C_2^\phi \frac{\partial \phi}{\partial \xi} \right) d\xi d\eta d\tau &\equiv \left[ \left( C_3^\phi \frac{\partial \phi}{\partial \eta} + C_2^\phi \frac{\partial \phi}{\partial \xi} \right)_n^{n+\theta} - \left( C_3^\phi \frac{\partial \phi}{\partial \eta} + C_2^\phi \frac{\partial \phi}{\partial \xi} \right)_s^{n+\theta} \right] \Delta\xi \Delta\tau \end{aligned} \quad (6.3)$$

onde “ $\theta$ ” é um parâmetro relativo à evolução temporal da solução, podendo variar entre 0 e 1, com os extremos caracterizando, respectivamente, formulação explícita e totalmente implícita. O superíndice “n” corresponde ao tempo da solução. Assim, “n+1” se refere ao tempo  $t+\Delta t$ , enquanto que “n” diz respeito ao tempo  $t$ .

Para avaliar o valor da variável e suas derivadas nas faces, será utilizado o esquema WUDS (*Weighted Upstream Differencing Scheme*) [125], que leva em consideração a importância relativa entre os processos convectivos e difusivos nas faces dos volume de controle. Isto é feito através de parâmetros  $\bar{\alpha}$  e  $\bar{\beta}$ , cujas expressões foram obtidas da solução de um problema convectivo-difusivo unidimensional, sendo avaliados em cada face. Expressões para  $\bar{\alpha}$  e  $\bar{\beta}$  são dadas em [125], e reproduzidas a seguir

$$\begin{aligned} \bar{\alpha} &= \frac{r^2}{10 + 2r^2}, \\ \bar{\beta} &= \frac{1 + 0,005r^2}{1 + 0,05r^2} \end{aligned} \quad (6.4)$$

onde “r” é o número de Peclet da malha, dado pela relação entre fluxos convectivo e difusivo, conforme a expressão abaixo

$$r = \frac{\rho \tilde{U}}{C_1 \phi} \quad (6.5)$$

A função de interpolação para avaliar o valor de  $\phi$  e suas derivadas nas faces é tal que recai em diferenças centrais quando o problema é difusivo dominante ( $\bar{\alpha}=0$  e  $\bar{\beta}=1$ ) e recai no esquema para frente ("*upwind*") quando for convectivo dominante ( $\bar{\alpha}=0,5$  e  $\bar{\beta}=0$ ). Assim tem-se para  $\phi$

$$\begin{aligned} \phi_e &= (1/2 + \bar{\alpha}_e) \phi_P + (1/2 - \bar{\alpha}_e) \phi_E, \\ \phi_w &= (1/2 + \bar{\alpha}_w) \phi_W + (1/2 - \bar{\alpha}_w) \phi_P, \\ \phi_n &= (1/2 + \bar{\alpha}_n) \phi_P + (1/2 - \bar{\alpha}_n) \phi_N, \\ \phi_s &= (1/2 + \bar{\alpha}_s) \phi_S + (1/2 - \bar{\alpha}_s) \phi_P, \end{aligned} \quad (6.6)$$

e para suas derivadas diretas

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial \phi}{\partial \xi} \right|_e &= \bar{\beta}_e \frac{\phi_E - \phi_P}{\Delta \xi}, & \left. \frac{\partial \phi}{\partial \xi} \right|_w &= \bar{\beta}_w \frac{\phi_P - \phi_W}{\Delta \xi}, \\ \left. \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \right|_n &= \bar{\beta}_n \frac{\phi_N - \phi_P}{\Delta \eta}, & \left. \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \right|_s &= \bar{\beta}_s \frac{\phi_P - \phi_S}{\Delta \eta} \end{aligned} \quad (6.7)$$

Para derivadas cruzadas, usando-se um esquema de diferenças centrais, tem-se

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \right|_e &= \frac{\phi_{NE} + \phi_N - \phi_{SE} - \phi_S}{4 \Delta \eta}, \\ \left. \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \right|_w &= \frac{\phi_{NW} + \phi_N - \phi_{SW} - \phi_S}{4 \Delta \eta}, \\ \left. \frac{\partial \phi}{\partial \xi} \right|_n &= \frac{\phi_{NE} + \phi_E - \phi_{NW} - \phi_W}{4 \Delta \xi}, \\ \left. \frac{\partial \phi}{\partial \xi} \right|_s &= \frac{\phi_{SE} + \phi_E - \phi_{SW} - \phi_W}{4 \Delta \xi} \end{aligned} \quad (6.8)$$

Substituindo-se as expressões das Eqs.(6.6) a (6.8) nos termos discretizados, dados nas Eqs.(6.1) a (6.3), chega-se à equação aproximada, representada abaixo.

$$\begin{aligned}
 \rho_P \frac{\phi_P^{n+1}}{J_P^{n+1}} \frac{\Delta \forall}{\Delta \tau} + A_P^* \phi_P^{n+\theta} = & A_e \phi_E^{n+\theta} + A_w \phi_W^{n+\theta} + A_n \phi_N^{n+\theta} + A_s \phi_S^{n+\theta} + \\
 & + A_{ne} \phi_{NE}^{n+\theta} + A_{nw} \phi_{NW}^{n+\theta} + A_{se} \phi_{SE}^{n+\theta} + A_{sw} \phi_{SW}^{n+\theta} + \rho_P \frac{\phi_P^n}{J_P^n} \frac{\Delta \forall}{\Delta \tau} + L[\hat{S}^\phi] \Delta \forall
 \end{aligned}
 \tag{6.9}$$

onde

$$\begin{aligned}
 A_P^* &= A_e + A_w + A_n + A_s \\
 A_e &= -\dot{M}_e(1/2 - \bar{\alpha}_e) + \bar{\beta}_e D_e + D_e^* \\
 A_w &= \dot{M}_w(1/2 - \bar{\alpha}_w) + \bar{\beta}_w D_w + D_w^* \\
 A_n &= -\dot{M}_n(1/2 - \bar{\alpha}_n) + \bar{\beta}_n D_n + D_n^* \\
 A_s &= -\dot{M}_s(1/2 - \bar{\alpha}_s) + \bar{\beta}_s D_s + D_s^* \\
 A_{ne} &= D_{ne}^* \\
 A_{nw} &= D_{nw}^* \\
 A_{se} &= D_{se}^* \\
 A_{sw} &= D_{sw}^*
 \end{aligned}
 \tag{6.10}$$

com

$$\begin{aligned}
 \dot{M}_e &= (\rho \tilde{U})_e^{n+\theta} \Delta \eta \\
 \dot{M}_w &= (\rho \tilde{U})_w^{n+\theta} \Delta \eta \\
 \dot{M}_n &= (\rho \tilde{V})_n^{n+\theta} \Delta \xi \\
 \dot{M}_s &= (\rho \tilde{V})_s^{n+\theta} \Delta \xi
 \end{aligned}
 \tag{6.11}$$

$$\begin{aligned}
 D_e &= C_{1,e}^\phi \Delta \eta / \Delta \xi \\
 D_w &= C_{1,w}^\phi \Delta \eta / \Delta \xi \\
 D_n &= C_{3,n}^\phi \Delta \xi / \Delta \eta \\
 D_s &= C_{3,s}^\phi \Delta \xi / \Delta \eta
 \end{aligned}
 \tag{6.12}$$

$$\begin{aligned}
D_e^* &= (C_{2,n}^\phi - C_{2,s}^\phi) / 4 = -D_w^* \\
D_n^* &= (C_{2,e}^\phi - C_{2,w}^\phi) / 4 = -D_s^* \\
D_{ne}^* &= (C_{2,e}^\phi + C_{2,n}^\phi) / 4 \\
D_{se}^* &= -(C_{2,e}^\phi + C_{2,s}^\phi) / 4 \\
D_{nw}^* &= -(C_{2,w}^\phi + C_{2,n}^\phi) / 4 \\
D_{sw}^* &= (C_{2,w}^\phi + C_{2,s}^\phi) / 4
\end{aligned} \tag{6.13}$$

A notação  $L[ ]$  representa a aproximação numérica do termo dentro dos colchetes.

A Eq.(6.9) é geral, podendo ser resolvida explicitamente ou implicitamente com relação ao tempo, variando-se o valor de  $\theta$  entre zero e a unidade. Neste trabalho, opta-se pela solução totalmente implícita, com  $\theta=1$ . A equação, então, fica

$$A_P \phi_P = \sum (A_{nb} \phi_{NB})_P + A_P^0 \phi_P^0 + L[\hat{S}^\phi] \Delta \forall \tag{6.14}$$

Nesta nova notação, todas as variáveis são avaliadas no instante de tempo atual,  $t + \Delta t$ , enquanto apenas os termos que apresentam o superscrito "o" se referem ao instante de tempo anterior,  $t$ . O subíndice "nb" ou "NB" se refere aos oito pontos vizinhos ao ponto  $P$ , relativos às faces e aos centros de volumes de controle, respectivamente. Assim,

$$\begin{aligned}
\sum (A_{nb} \phi_{NB})_P &= A_e \phi_E + A_w \phi_W + A_n \phi_N + A_s \phi_S + \\
&+ A_{ne} \phi_{NE} + A_{nw} \phi_{NW} + A_{se} \phi_{SE} + A_{sw} \phi_{SW}
\end{aligned} \tag{6.15}$$

Os coeficientes  $A_P$  e  $A_P^0$  são dados por

$$\begin{aligned}
A_P &= \frac{\rho_P}{J_P} \frac{\Delta \forall}{\Delta \tau} + A_P^*, \\
A_P^0 &= \frac{\rho_P}{J_P^0} \frac{\Delta \forall}{\Delta \tau}
\end{aligned} \tag{6.16}$$

É importante ressaltar que utilizando-se o arranjo colocalizado de variáveis tem-se o mesmo volume de controle para todas as variáveis. Isto faz com que os coeficientes das equações de conservação da quantidade de movimento para  $u$  e  $v$  sejam iguais.



Além disto, os fluxos de massa  $\dot{M}$  e as métricas que entram no cálculo dos coeficientes são iguais, não importa qual a variável em questão.

### 6.3- ACOPLAMENTO PRESSÃO-VELOCIDADE

Em escoamentos compressíveis em que a massa específica varia consideravelmente no domínio, em função da pressão e da temperatura, uma equação de estado relacionando estas três variáveis serve de equação evolutiva para a pressão, enquanto a equação de conservação da massa o é para a massa específica. Porém, em escoamentos incompressíveis onde a massa específica é constante ou função apenas da temperatura não existe uma equação natural para o avanço da pressão. Neste caso, a pressão somente aparece na forma de gradientes nas equações do movimento e a equação de conservação da massa torna-se apenas uma restrição a ser obedecida pelo campo de velocidades. Assim, o acoplamento entre a pressão e a velocidade torna-se muito forte e importante para a correta solução do problema. Vários métodos foram criados para tratar convenientemente este acoplamento, de forma a calcular um campo de pressão que, quando inserido nas equações de movimento, originem um campo de velocidades que satisfaça a equação de conservação da massa. Todos eles utilizam o princípio de transformar a equação de conservação da massa numa equação evolutiva para pressão.

Este assunto é vastamente discutido em [110], sendo que este trabalho se restringirá a descrever o método SIMPLEC, desenvolvido por Van Doormaal e Raithby em [123] e escolhido para ser utilizado no tratamento do acoplamento pressão-velocidade, sempre que necessário.

#### 6.3.1- Avaliação das Velocidades nas Faces

Sempre se utilizou o armazenamento desencontrado das variáveis na malha com a finalidade de promover a estabilidade do acoplamento pressão-velocidade, pois, neste arranjo, as velocidades ficam sujeitas aos gradientes de pressão dos pontos vizinhos mais próximos. Porém, como ressaltado na seção 6.1, a utilização de arranjo desencontrado é inconveniente do ponto de vista computacional, principalmente em problemas tridimensionais.

Quando se utiliza o armazenamento colocalizado das variáveis, é necessário avaliar o valor das velocidades nas faces do volume de controle. Esta avaliação deve ser feita relacionando as

velocidades e os gradientes de pressão de forma semelhante à obtida para o arranjo desencontrado. Existem diversas maneiras possíveis de fazê-lo, o que deu origem a vários métodos diferentes.

Uma primeira forma de avaliar o valor das velocidades cartesianas nas faces foi proposta por Peric et al. [119] como uma interpolação linear entre as velocidades vizinhas, desconsiderando seus termos de gradiente de pressão e usando o gradiente de pressão relativo aos pontos mais próximos. Porém, foi demonstrado por Majumdar, S. [124] que esta aproximação apresenta problemas. Quando utilizada sem um parâmetro de subrelaxação conveniente, a solução em regime permanente fica dependente do intervalo de avanço no tempo utilizado. Em [120] Marchi et al. apresentam um novo esquema que supera este problema, convergindo para uma única solução em regime permanente, independente do intervalo de tempo utilizado. Este será o esquema utilizado neste trabalho, sendo apresentado a seguir na avaliação do valor da velocidade  $u$  na face leste, como um exemplo.

A equação de movimento discretizada na forma da Eq.(6.14), para a velocidade  $u$  no ponto  $P$ , fica,

$$A_{P,P} u_P = \sum (A_{nb} u_{NB})_P + A_P^0 u_P^0 + L[\hat{S}^u] \Delta V - L[\hat{P}^u] \Delta V, \quad (6.17)$$

lembrando que o termo  $\hat{S}^\phi$  pode ser escrito como a soma entre o gradiente de pressão e o termo fonte associado à variável  $\phi$  da seguinte forma:

$$\hat{S}^\phi = -\hat{P}^\phi + \hat{S}^T \phi. \quad (6.18)$$

Agora, fazendo

$$B_P^u = A_P^0 u_P^0 + L[\hat{S}^u] \Delta V \quad (6.19)$$

a Eq.(6.17), escrita em uma forma compacta, fica

$$A_{P,P} u_P = \sum (A_{nb} u_{NB})_P + B_P^u - L[\hat{P}^u]_P \Delta V \quad (6.20)$$

Analogamente, a equação para velocidade  $u$  no ponto vizinho  $E$  fica

$$A_{P,E} u_E = \sum (A_{nb} u_{NB})_E + B_E^u - L[\hat{P}^u]_E \Delta V \quad (6.21)$$

O esquema utilizado foi proposto por Marchi e Maliska [120], e estabelece que

$$A_{P,e} u_e = \left[ \sum (A_{nb} u_{NB})_P + B_P^u + \sum (A_{nb} u_{NB})_E + B_E^u \right] / 2 - L[\hat{P}^u]_e \Delta \forall \quad (6.22)$$

com

$$A_{P,e} = \frac{A_{P,P} + A_{P,E}}{2} \quad (6.23)$$

e  $L[\hat{P}^u]_e$ , na Eq.(6.22), avaliado na face leste, fica

$$L[\hat{P}^u]_e = \frac{P_E - P_P}{\Delta \xi} (y_\eta)_e - \frac{P_N + P_{NE} - P_S - P_{SE}}{4\Delta \eta} (y_\xi)_e \quad (6.24)$$

Procedendo de forma similar, obtém-se uma expressão semelhante para velocidade  $v$ , avaliada na face leste,

$$A_{P,e} v_e = \left[ \sum (A_{nb} v_{NB})_P + B_P^v + \sum (A_{nb} v_{NB})_E + B_E^v \right] / 2 - L[\hat{P}^v]_e \Delta \forall \quad (6.25)$$

com  $L[\hat{P}^v]_e$ , na Eq.(6.25), avaliado na face leste, é dado por

$$L[\hat{P}^v]_e = \frac{P_N + P_{NE} - P_S - P_{SE}}{4\Delta \eta} (x_\xi)_e - \frac{P_E - P_P}{\Delta \xi} (x_\eta)_e \quad (6.26)$$

Deve-se notar que, como o volume de controle é o mesmo para todas as variáveis no arranjo colocalizado, tem-se  $A_P^u = A_P^v$ , ou seja, os coeficientes são iguais nas equações de movimento.

É importante ressaltar que os valores  $u_e$  e  $v_e$  correspondem aos valores médios das velocidades  $u$  e  $v$  na face leste, respectivamente.

Com isso, para avaliar a velocidade relativa transformada, média, na face leste,  $\tilde{U}_e$ , basta introduzir as Eqs.(6.22) e (6.25) na expressão

$$\tilde{U}_e = u_e (y_\eta)_e - v_e (x_\eta)_e - U_{Me} \quad (6.27)$$

com a velocidade da malha  $U_M$ , avaliado na face leste, como apresentado na seção 5.3.1, Eq. (5.42),

$$U_{Me} = \left( y_\eta^{(1/2)} x_\tau - x_\eta^{(1/2)} y_\tau \right)_e \quad (6.28)$$

Para as outras faces do volume de controle, o procedimento é totalmente análogo, sendo desnecessário mostrá-lo aqui.

### 6.3.2- Correção das Velocidades

Como ressaltado no início da seção 6.3, o método utilizado para tratamento do acoplamento pressão-velocidade neste trabalho será o SIMPLEC [123]. Todos os métodos desta classe utilizam o artifício de corrigir um campo de velocidades estimado, com relação à correção do campo de pressão, da seguinte maneira:

$$\begin{aligned} u &= u^* + u' \\ v &= v^* + v' \\ p &= p^* + p' \end{aligned} \quad (6.29)$$

onde o índice "\*" se refere a valores estimados ou conhecidos da iteração anterior e o índice "'" se refere à correção a ser aplicada. Os diversos métodos diferem na forma de corrigir os valores estimados ou conhecidos da iteração anterior.

No método SIMPLEC esta correção é dada para as velocidades nodais por

$$\begin{aligned} u_P &= u_P^* - d_P L[\hat{p}', u]_P \Delta V \\ v_P &= v_P^* - d_P L[\hat{p}', v]_P \Delta V \end{aligned} \quad (6.30)$$

com

$$d_P = \frac{1}{A_P - A_e - A_w - A_n - A_s} = \frac{1}{A_P - \sum (A_{nb})_P} \quad (6.31)$$

Quando se utiliza o arranjo colocalizado, a correção das velocidades médias nas faces é feita como, por exemplo, para a face leste

$$\begin{aligned} u_e &= u_e^* - d_e L[\hat{p}', u]_e \Delta V \\ v_e &= v_e^* - d_e L[\hat{p}', v]_e \Delta V \end{aligned} \quad (6.32)$$

com

$$d_e = \frac{d_P + d_E}{2} \quad (6.33)$$

Com as Eqs.(6.32) na Eq.(6.27) pode-se calcular a correção para as componentes contravariantes da velocidade relativa. Tomando  $\tilde{U}_e$  como exemplo, tem-se

$$\tilde{U}_e = \tilde{U}_e^* - d_e \left[ (y_\eta)_e L[\tilde{p}'^u]_e - (x_\eta)_e L[\tilde{p}'^v]_e \right] \Delta V \quad (6.34)$$

Substituindo os valores aproximados dos gradientes de pressão, dados nas Eqs.(6.24) e (6.26), e lembrando que agora se trata do campo de correção de pressão,  $P'$ , obtém-se

$$\tilde{U}_e = \tilde{U}_e^* - d_e \left[ \alpha_e \frac{P'_E - P'_P}{\Delta \xi} - \beta_e \frac{P'_N + P'_{NE} - P'_S - P'_{SE}}{4\Delta \eta} \right] \Delta V \quad (6.35)$$

As demais expressões para correção das componentes das velocidades relativas nas outras faces são obtidas de maneira similar.

### 6.3.3- Obtenção da Equação para a Pressão

Conforme ressaltado no início da seção 6.3, os métodos de tratamento do acoplamento pressão-velocidade transformam a equação da conservação da massa numa equação evolutiva para a pressão. A equação da conservação da massa discretizada em volumes finitos toma a forma

$$\left( \frac{\rho_P}{J_P} - \frac{\rho_P}{J_P^0} \right) \frac{\Delta V}{\Delta \tau} + \dot{M}_e - \dot{M}_w + \dot{M}_n - \dot{M}_s = 0 \quad (6.36)$$

com os valores de  $\dot{M}$  nas faces, dados nas Eqs.(6.11). Introduzindo as expressões de correção das velocidades relativas transformadas nas faces, Eq.(6.35) e suas similares, obtém-se uma equação evolutiva para o campo de pressão de correção  $P'$  da forma

$$a_P P'_P = \sum (a_{nb} P'_{NB})_P + b_P \quad (6.37)$$

com

$$\begin{aligned} \sum (a_{nb} P'_{NB})_P = & a_e P'_E + a_w P'_W + a_n P'_N + a_s P'_S + \\ & + a_{ne} P'_{NE} + a_{nw} P'_{NW} + a_{se} P'_{SE} + a_{sw} P'_{SW} \end{aligned} \quad (6.38)$$

$$a_P = \sum (a_{nb})_P = \rho_e d_e \alpha_e \Delta \eta^2 + \rho_w d_w \alpha_w \Delta \eta^2 + \rho_n d_n \gamma_n \Delta \xi^2 + \rho_s d_s \gamma_s \Delta \xi^2 \quad (6.39)$$

$$\begin{aligned} a_e &= \rho_e d_e \alpha_e \Delta \eta^2 - \rho_n d_n \frac{\beta_n}{4} \Delta \forall + \rho_s d_s \frac{\beta_s}{4} \Delta \forall \\ a_w &= \rho_w d_w \alpha_w \Delta \eta^2 + \rho_n d_n \frac{\beta_n}{4} \Delta \forall - \rho_s d_s \frac{\beta_s}{4} \Delta \forall \end{aligned} \quad (6.40a)$$

$$\begin{aligned} a_n &= \rho_n d_n \gamma_n \Delta \xi^2 - \rho_e d_e \frac{\beta_e}{4} \Delta \forall + \rho_w d_w \frac{\beta_w}{4} \Delta \forall \\ a_s &= \rho_s d_s \gamma_s \Delta \xi^2 + \rho_e d_e \frac{\beta_e}{4} \Delta \forall - \rho_w d_w \frac{\beta_w}{4} \Delta \forall \\ a_{ne} &= -\rho_e d_e \frac{\beta_e}{4} \Delta \forall - \rho_n d_n \frac{\beta_n}{4} \Delta \forall \\ a_{nw} &= \rho_w d_w \frac{\beta_w}{4} \Delta \forall + \rho_n d_n \frac{\beta_n}{4} \Delta \forall \end{aligned} \quad (6.40b)$$

$$\begin{aligned} a_{se} &= \rho_e d_e \frac{\beta_e}{4} \Delta \forall + \rho_s d_s \frac{\beta_s}{4} \Delta \forall \\ a_{sw} &= -\rho_w d_w \frac{\beta_w}{4} \Delta \forall - \rho_s d_s \frac{\beta_s}{4} \Delta \forall \end{aligned}$$

$$b_P = \left( \frac{\rho_P}{J_P} - \frac{\rho_P}{J_P^0} \right) \frac{\Delta \forall}{\Delta \tau} - (\dot{M}_e^* - \dot{M}_w^* + \dot{M}_n^* - \dot{M}_s^*) \quad (6.41)$$

onde  $\dot{M}^*$  é o fluxo de massa nas faces, conforme as Eqs.(6.11), calculado com os valores estimados das componentes contravariantes da velocidade relativa, como a seguir

$$\begin{aligned} \dot{M}_e^* &= \rho_e \tilde{U}_e^* \Delta \eta \\ \dot{M}_w^* &= \rho_w \tilde{U}_w^* \Delta \eta \\ \dot{M}_n^* &= \rho_n \tilde{V}_n^* \Delta \xi \\ \dot{M}_s^* &= \rho_s \tilde{V}_s^* \Delta \xi \end{aligned} \quad (6.42)$$

Deve-se notar que a expressão do termo fonte  $b_P$ , Eq.(6.41), corresponde à equação de conservação da massa, Eq.(6.36), aplicada ao campo de velocidades estimado ou conhecido da iteração anterior. O termo fonte representa o quanto este campo de velocidades deixa de satisfazer a equação de conservação da massa, transmitindo esta informação ao cálculo do novo campo de pressão de correção  $P'$ , na Eq.(6.37). Deseja-se ainda ressaltar que as velocidades relativas nas faces utilizadas no cálculo do termo fonte,

$b_p$ , devem ser avaliadas com base no campo de velocidades conhecido, utilizando o método apresentado na seção 6.3.1.

#### 6.4- ALGORITMO GERAL

No presente trabalho foi adotado o método segregado de solução, no qual cada sistema linear correspondente a cada equação física é resolvido separadamente, de forma seqüenciada. Deve-se ressaltar que apenas neste caso um tratamento especial para o acoplamento pressão-velocidade é necessário, pois, na solução direta, onde todos os sistemas lineares são resolvidos simultaneamente este acoplamento resulta da própria solução. Mesmo na solução direta, seriam necessárias iterações a fim de atualizar os coeficientes das equações discretizadas, devido às não linearidades.

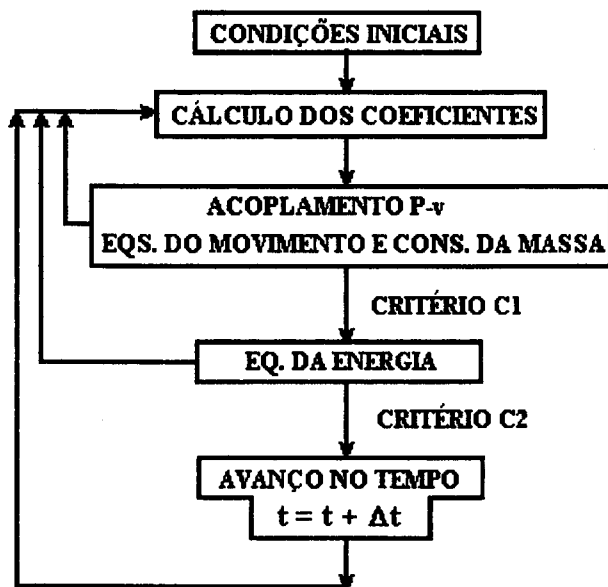
A metodologia descrita no capítulo 5 prevê a utilização de malha ajustável para tratar problemas de mudança de fase. Desta forma, a malha pode ser gerada em função da própria solução em cada intervalo de tempo, ou, de tempos em tempos.

Para facilitar o entendimento do algoritmo geral da solução numérica, é necessário ressaltar que iterações existem pelos três motivos seguintes

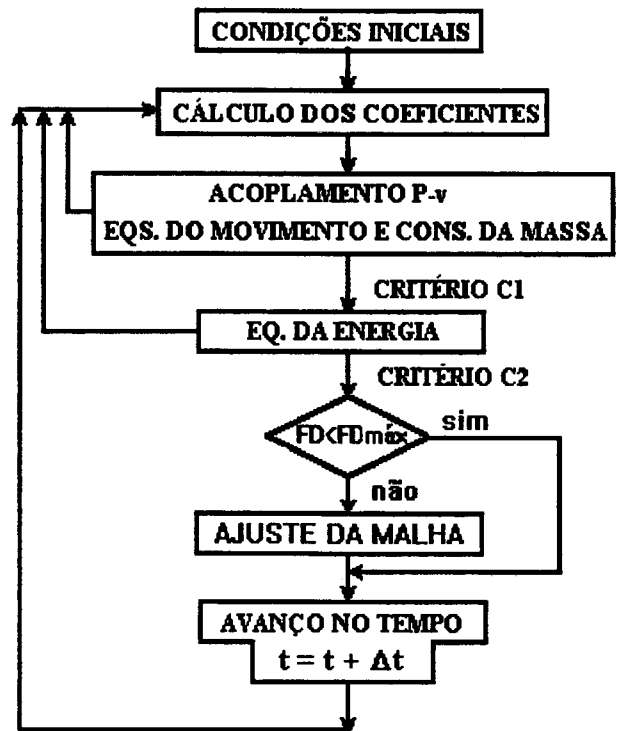
- 1- Não linearidade das equações Gera a necessidade de atualizar os coeficientes das equações discretizadas sempre que um novo campo de variáveis for calculado.
- 2- Acoplamentos em solução segregada. Conforme já ressaltado, numa solução segregada os acoplamentos do problema têm de ser resolvidos iterativamente. Os mais importantes são:
  - acoplamento pressão-velocidade, em que campos estimados são corrigidos até que se satisfaça a um critério de convergência (C1).
  - acoplamento entre equação de movimento em  $v$  e equação da energia. Devido à aproximação de Boussinesq, na equação do movimento em  $v$  aparece o termo de flutuação como termo fonte, que é função da temperatura, calculada pela equação da energia. Desta forma, é necessário recalcular os campos de pressão e velocidades para novos valores do campo de temperatura, até que um critério de convergência (C2) seja satisfeito.

- 3- Adaptação da malha à solução, faz com que uma nova malha seja gerada para cada solução convergida, no método da malha coincidente com a interface. Porém, a solução também é função do deslocamento da malha, devendo ser recalculada para a nova malha até que um critério de convergência final (C3) seja satisfeito. Os demais métodos não iteram em função da malha.

Um algoritmo geral simplificado para cada um dos métodos é apresentado em forma de fluxograma na Fig.6.3, a fim de mostrar os níveis iterativos para cada intervalo de tempo e como a solução avança no tempo.

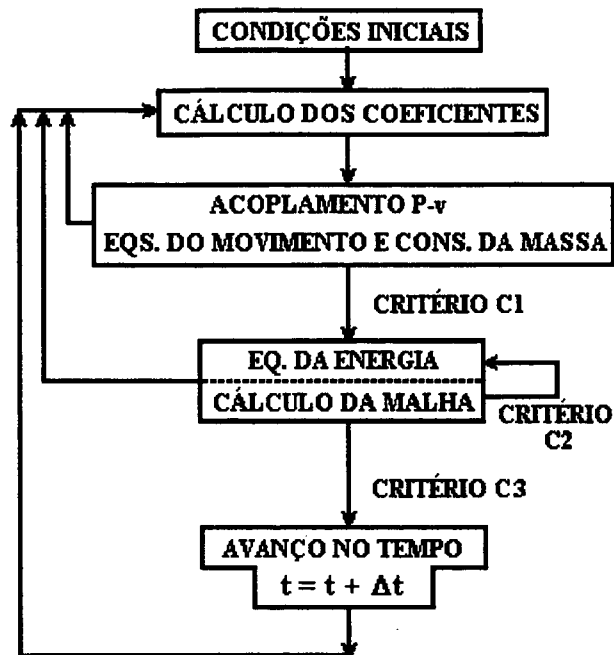


a) Método de Voller



b) Método com Malha Ajustável





### c) Método com Malha Coincidente com a Interface

Fig. 6.3 - Fluxogramas dos algoritmos simplificados

A seguir, são apresentados os principais passos de um algoritmo geral para a solução numérica. Na medida do possível a diferenciação entre os métodos de tratar o problema térmico é feita ao longo da sequência. Evitou-se entrar em maiores detalhes, pois, além destes terem sido apresentados devidamente no capítulo 5, poderiam vir a prejudicar o entendimento do algoritmo como um todo.

### CONDIÇÕES INICIAIS

- 1- Partir da solução analítica de Newmann como condição inicial para um pequeno intervalo de tempo. Estimar campos iniciais para  $u$ ,  $v$ ,  $\hat{P}^*$  e  $T$ .
- 2- Calcular a primeira malha coincidente com a fronteira, adaptada a essa solução
- 3- Calcular as métricas  $(\alpha, \beta, \gamma)$ , o jacobiano  $(J)$  e as derivadas  $y_\eta, y_\xi, x_\eta, x_\xi$ , nos pontos e nas faces dos volumes de controle.

- 4- Estimar valores iniciais para as velocidades dos pontos da malha  $x_r$  e  $y_r$  iguais a zero.

### **CÁLCULO DOS COEFICIENTES**

- 5- Calcular o termo fonte (termo de flutuação - aproximação de Boussinesq) da equação de movimento  $v$ , com campo de temperatura  $T$  conhecido
- 6- Calcular os coeficientes das equações do movimento  $u$  e  $v$  usando valores conhecidos, quer estimados, quer provenientes da última iteração. Eqs.(6.10) a (6.13)

### **ACOPLAMENTO PRESSÃO-VELOCIDADE**

- 7- Com  $\hat{P}^*$ , quer estimado, quer proveniente da iteração anterior, nas equações do movimento  $u$  e  $v$  discretizadas, calcular campos de velocidades estimadas  $u^*$  e  $v^*$ . Este item envolve a solução de dois sistemas lineares.
- 8- Calcular os coeficientes da equação do campo de pressão de correção  $\hat{P}'$ , Eq.(6.37), usando Eqs.(6.39) e (6.40), e o termo fonte dado na Eq.(6.41), usando as velocidades médias avaliadas nas faces relativas aos campos conhecidos  $u^*$  e  $v^*$ , como na Eq. (6.42), usando a Eq. (6.27).
- 9- Resolver a Eq.(6.37), obtendo um campo de pressão de correção  $\hat{P}'$ . Este item envolve a solução de um sistema linear.
- 10- Corrigir as velocidades nodais estimadas  $u^*$  e  $v^*$  com relação ao campo  $\hat{P}'$ , usando Eqs.(6.30) e (6.31).
- 11- Corrigir o campo de pressão estimado, fazendo  $\hat{P} = \hat{P}^* + \hat{P}'$ .
- 12- Fazer  $\hat{P}^* = \hat{P}$  e voltar ao item 6 até obter convergência com o critério C1.

### **EQUAÇÃO DA ENERGIA**

- 13- Calcular os coeficientes da equação da energia.
- 14- Calcular os coeficientes dos vizinhos aos volumes em mudança de fase. (Passo necessário somente ao método novo com a malha ajustável.)
- 15- Resolver a equação da energia e obter  $T$ . Este passo envolve a solução de um sistema linear.
- 16- Aplicar o balanço de energia nos volumes em mudança de fase. Calcular novas frações de líquido (Método de Voller e método novo com malha ajustável), ou calcular novos jacobianos para os volumes em mudança de fase (método novo com malha coincidente com interface).
- 17- 17a- Atualizar termos fonte, voltar a 15 e iterar até satisfazer ao balanço de energia. (Método de Voller.)

- 17b- Voltar ao item 14 e iterar até obter convergência do balanço de energia. (Método novo com malha ajustável.)
- 17c- Calcular nova malha e novas métricas, derivadas nas faces e velocidades da malha e voltar ao item 14. (No método novo com a malha coincidente com a interface, a malha deve ir sendo calculada concomitantemente.)
- 18- Voltar ao item 5 e iterar até obter convergência do campo de temperatura, critério de convergência C2.

### **CÁLCULO DA MALHA (método novo com malha ajustável)**

- 19- Calcular o “fator de desalinhamento - FD” com relação à solução convergida. Se for menor que o valor admissível, a malha permanece fixa, então fazer as velocidades dos pontos da malha,  $x_\tau$  e  $y_\tau$ , iguais a zero e seguir para o item 23.
- 20- No caso de desalinhamento maior que o admissível, calcular nova malha.
- 21- Calcular novas métricas ( $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$ ), o jacobiano (J) e as derivadas  $y_\eta$ ,  $y_\xi$ ,  $x_\eta$ ,  $x_\xi$ , nos pontos e nas faces dos volumes de controle.
- 22- Atualizar valores para as velocidades dos pontos da malha,  $x_\tau$  e  $y_\tau$ .

### **AVANÇO NO TEMPO**

- 23- Dar um avanço no tempo, somando um incremento  $\Delta t$  ao tempo atual.
- 24- Prever a nova posição da interface considerando a velocidade da interface constante, e calcular um campo de fração de líquido estimado no tempo atual, que será usado no termo fonte da equação da energia.
- 25- Voltar ao item 5 e iterar para o novo tempo.

## **CAPÍTULO 7**

### **RESULTADOS**

#### **7.1- CONSIDERAÇÕES GERAIS**

No presente capítulo são apresentadas algumas soluções, utilizando o novo método. O principal objetivo é mostrar o desempenho do método em situações comumente apresentadas na literatura. O presente trabalho se dispôs a desenvolver uma nova metodologia para modelar numericamente problemas com mudança de fase. Portanto, o objetivo deste capítulo não é a solução de problemas práticos em si, mas sim, um estudo das possibilidades do novo método.

Na seção 7.2 estuda-se o efeito da descontinuidade das propriedades termofísicas na solução de problema de mudança de fase unidimensional. As soluções com o novo método são comparadas com a solução analítica de Neumann, e com a solução pelo método de Voller [89].

Na seção 7.3 apresenta-se a solução da mudança de fase bidimensional, com malha fixa. Compara-se o desempenho do novo método com o método de Voller [89] e dados fornecidos pela literatura.

Uma solução de mudança de fase bidimensional com malha móvel é apresentada na seção 7.4. Compara-se com a solução usando malha fixa, e estuda-se o efeito da variação do fator de desalinhamento,  $FD$ , na qualidade da solução.

Na seção 7.5 um problema de mudança de fase com convecção na fase líquida é resolvido. As soluções são comparadas com resultados numéricos e experimentais apresentados na literatura.

#### **7.2- SOLUÇÃO 1-D COM PROPRIEDADES DESCONTÍNUAS**

Como ressaltado na seção 2.1, é comum a existência de uma descontinuidade nas propriedades termofísicas do material quando este muda de fase. Esta variação do valor das propriedades pode ser grande, introduzindo mais uma dificuldade na solução do problema de mudança de fase.

Nesta seção são apresentadas soluções de dois problemas retirados de trabalhos publicados que estudam o efeito desta descontinuidade. São eles

### Problema 1

Dados de Lee & Tzong [87], para uma solidificação com propriedades descontínuas

$$\begin{aligned} Ste &= (c_{pL}T_L - c_{pS}T_S) / \lambda = 0,5 \\ k_S / k_L &= 5 \\ c_{pS} / c_{pL} &= 0,5 \end{aligned} \quad (7.1)$$

O problema foi resolvido com

$$\begin{aligned} T_L &= T_\infty = 0,2 [^\circ\text{C}] \\ T_S &= T_w = -1,6 [^\circ\text{C}] \\ \lambda &= 2 [\text{J/kg}] \\ \rho &= 1 [\text{kg/m}^3] \end{aligned} \quad (7.2)$$

e

$$\begin{aligned} \Delta x &= 0,05 \\ \Delta Fo &= 0,00015 \end{aligned} \quad (7.3)$$

onde Fo é o tempo adimensional, dado por

$$Fo = \frac{\alpha_L t}{L^2} \quad (7.4)$$

e x é a coordenada adimensionalizada com relação ao comprimento  $L=1\text{m}$ .

A figura 7.1 apresenta a variação da posição da interface no tempo. Verifica-se que o método de Voller atrasa a interface quando esta caminha na primeira metade de um volume da malha, adiantando-a quando esta se encontra no final do volume. Esta conclusão é facilmente observada na figura 7.1, lembrando-se que a malha é uniforme com  $\Delta x=0,05$ . Fica fácil distinguir os 6 volumes da malha pelos quais a interface passou durante o tempo da solução, com uma rápida inspeção no gráfico.

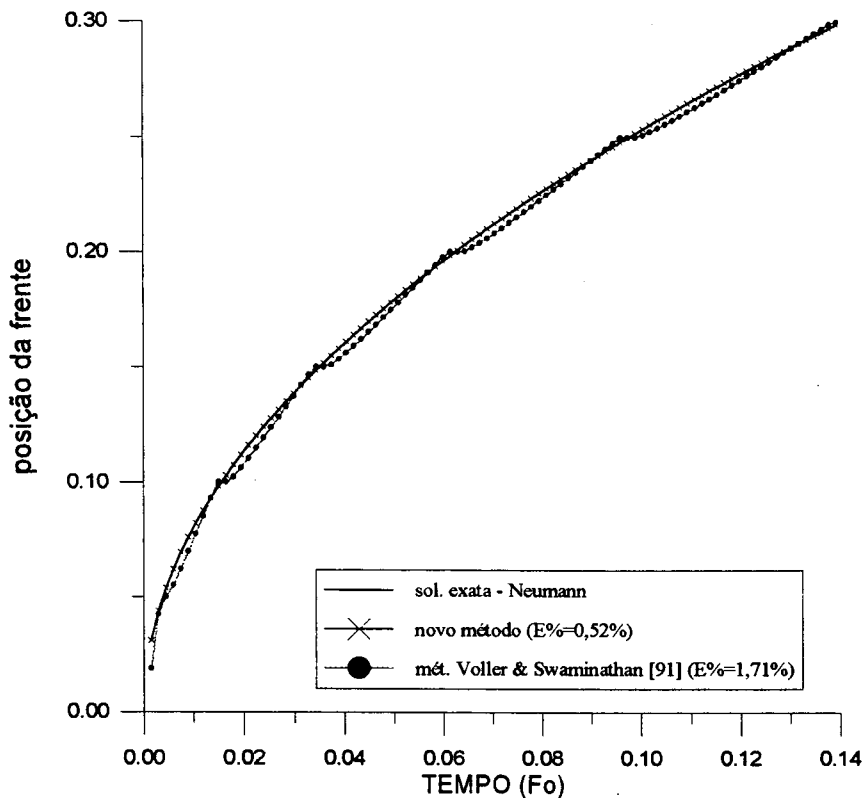


Fig. 7.1- Posição da interface no problema de Lee & Tzong[87]

O novo método não apresenta este inconveniente, apresentando um erro com relação à solução exata praticamente constante da ordem de 0,5%, durante todo o tempo da solução. Isto mostra que a solução fica mais independente da malha, devido ao novo tratamento dado aos fluxos de calor junto à interface.

A figura 7.2 apresenta o histórico de variação da temperatura no ponto  $x=0,175$ . Verifica-se que mesmo para o novo método existe uma certa dificuldade em prever corretamente a temperatura no ponto. Porém, fica claro que o método de Voller[89] apresenta uma dificuldade muito maior em calcular corretamente a temperatura. Isto porque o método faz a temperatura nula no volume em mudança de fase, enquanto a interface está nele, resultando numa curva com “degraus”, como se verifica na Fig. 7.2.

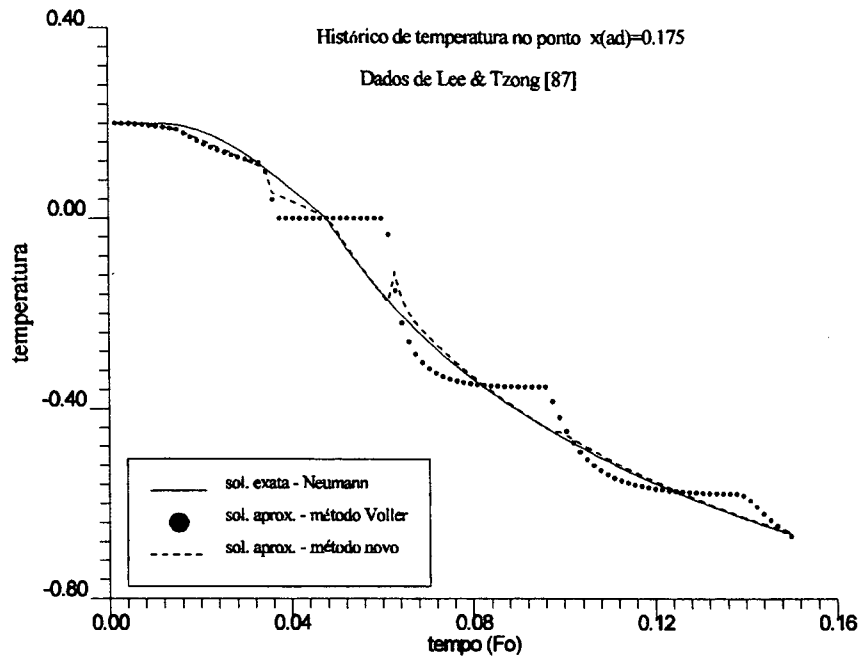


Fig. 7.2- Histórico de temperatura no problema de Lee & Tzong[87]

## Problema 2

Dados de Voller [89], para uma solidificação com propriedades descontínuas

$$\begin{aligned} Ste &= (c_{pL} T_L - c_{pS} T_S) / \lambda = 0,229 \\ k_S / k_L &= 3,993 \\ c_{pS} / c_{pL} &= 0,417 \end{aligned} \quad (7.5)$$

O problema foi resolvido com

$$\begin{aligned} k_L &= 0,556 \text{ [J / s m K]}; \quad k_S = 2,22 \text{ [J / s m K]} \\ \rho c_L &= 4,226 \times 10^6 \text{ [J / m}^3 \text{ K]}; \quad \rho c_S = 1,762 \times 10^6 \text{ [J / m}^3 \text{ K]} \\ \rho \lambda &= 338 \times 10^6 \text{ [J / m}^3 \text{]} \end{aligned} \quad (7.6)$$

$$\begin{aligned} T_L &= T_\infty = 10 [^\circ \text{C}] \\ T_S &= T_w = -20 [^\circ \text{C}] \end{aligned} \quad (7.7)$$

e

$$\begin{aligned} L &= 0,25 \text{ m} \\ \Delta x &= 0,05 \\ \Delta Fo &= 0,000632 \end{aligned} \quad (7.8)$$

A posição da interface no tempo é mostrada na figura 7.3, e o histórico de temperatura para o ponto  $x=0,175$  (adimensional) na figura 7.4.

O mesmo comportamento das figuras 7.1 e 7.2 relativas ao problema de Lee & Tzong [87] aparece nas figuras 7.3 e 7.4, para o problema de Voller [89]. Verifica-se que o segundo problema é um pouco menos rigoroso que o primeiro, por apresentar menor descontinuidade nas propriedades e por possuir menor número de Stefan. Por isso, esperam-se menores erros neste segundo problema que no primeiro.

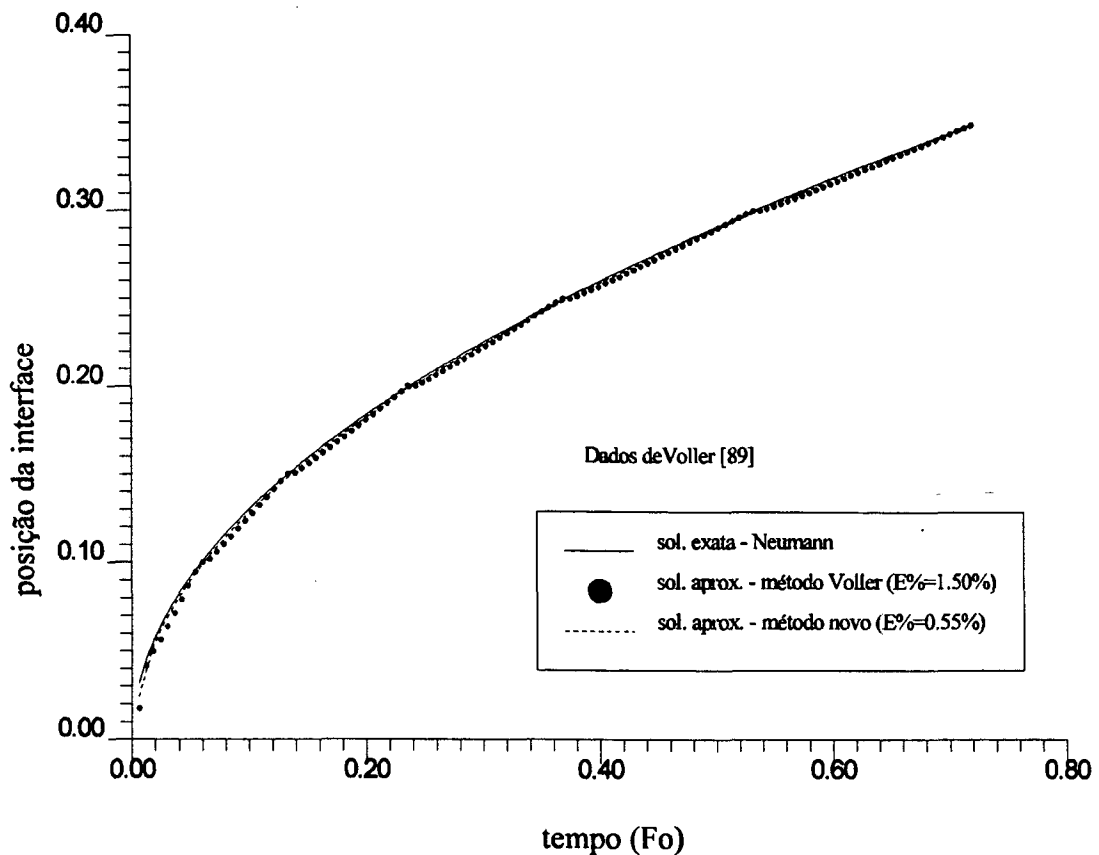


Fig. 7.3- Posição da interface no problema de Voller[89]



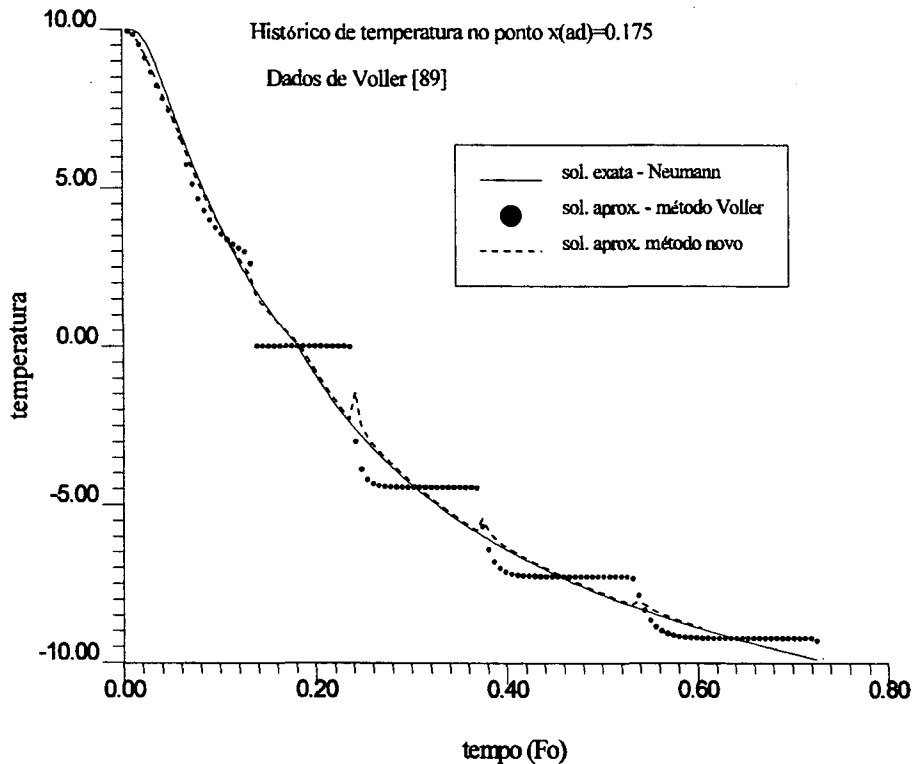


Fig. 7.4- Histórico de temperatura no problema de Voller[89]

O valor do erro médio foi obtido pela soma do módulo dos erros percentuais da solução aproximada com relação à exata em cada tempo, dividida pelo número de avanços de tempo. Os erros dos dois avanços iniciais não foram contabilizados, pois, como explicado na seção 4.3.3, no início, as variações no problema de mudança de fase são altamente não lineares, dificultando sua solução por métodos numéricos, que, em geral, utilizam aproximações lineares.

Verifica-se que nos dois problemas os erros percentuais médios das soluções com o novo método são significativamente menores que para o método de Voller.

Cabe ainda ressaltar que a comparação do valor médio do erro é muito mais conclusiva do que a comparação de apenas um valor, como feito por Voller [89], na Tabela 2. Nesta ele compara o erro das soluções com relação à solução exata apenas para a interface na posição  $x=0,05m$ , ou, em termos adimensionais,  $x(ad)=0,2$ . Coincidentemente esta posição corresponde a um fim de volume, ( pois, o  $\Delta x=0,005m$ ), exatamente onde o seu método apresenta menor erro. Observando as figuras 7.1 e 7.3 pode-se verificar que nos finais de volume o método de Voller praticamente coincide com a solução exata, ao passo que próximo

ao meio dos volumes o erro da solução aproximada é máximo. O cálculo do erro médio contabiliza os erros de todos os avanços de tempo, menos os dois primeiros, sendo, portanto representativo de toda a solução.

A comparação do histórico da temperatura em um ponto também é de suma importância para se conhecer o desempenho dos métodos aproximados em problemas com *mdf*, uma vez que resolver a equação de conservação da energia significa obter o perfil de temperatura. Se o método não o fizer corretamente, quer dizer que não é uma boa aproximação para a solução exata. A deficiência do método de Voller em prever corretamente a temperatura fica clara nas figuras 7.2 e 7.4. Esta é uma deficiência dos métodos de entalpia, de uma forma geral.

### 7.3- SOLUÇÃO 2-D COM MALHA FIXA

O problema da mudança de fase em um prisma quadrado infinito, a partir das suas faces, é muito conveniente para testar o desempenho de novos métodos de solução. Ele tem sido utilizado por muitos autores [26,27,32,62,76,79,126,127] para este fim. A figura 7.5 apresenta a geometria do problema, para o qual despreza-se a convecção no líquido. Devido à sua simetria, o problema pode ser resolvido em um quadrante do seu domínio, ou ainda em um octante, como mostrado na figura 7.5.

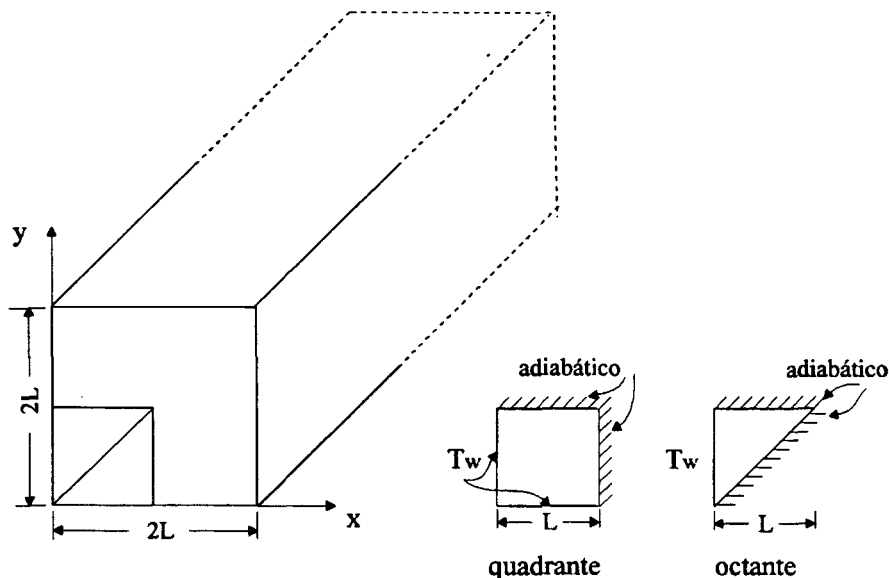


Fig. 7.5 - Domínio de solução

No presente trabalho optou-se pela utilização do octante como domínio de solução. A malha resultante é não ortogonal, com linhas  $\eta = \text{cte}$  na direção radial e linhas  $\xi = \text{cte}$  iniciando paralelas à parede do prisma e se tornando circulares.

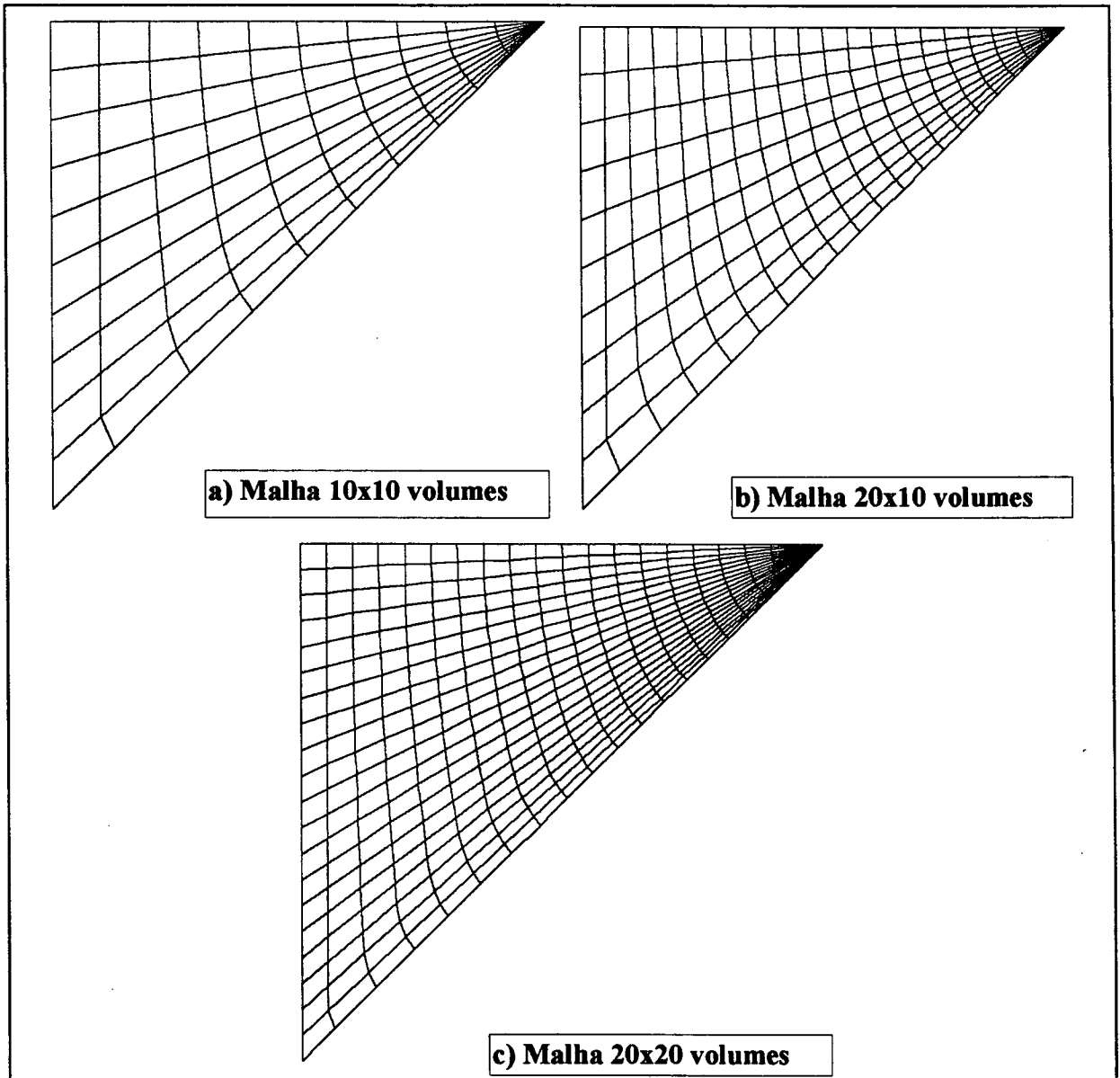


Fig. 7.6 - Malhas para o octante

Para as soluções apresentadas a seguir, três malhas foram utilizadas, com 10x10, 20x10 e 20x20 volumes, como mostrado na figura 7.6.

O primeiro problema é clássico, tendo sido resolvido por Lazaridis [26], Crowley [81], Cao et al. [76], Kim & Kaviany

[126], além de outros autores. Trata-se de um problema de Stefan, pois o líquido encontra-se inicialmente à temperatura de mudança de fase e a temperatura na parede cai para uma temperatura inferior a esta, iniciando a solidificação do material. As propriedades termodinâmicas são iguais nas duas fases e o número de Stefan utilizado no problema [26,76,81,126] é:

$$\text{Ste} = 1,0 / 1,561 = 0,6406$$

A figura 7.7 mostra a posição da interface para cada 10 avanços de tempo, para a solução usando o novo método com uma malha 10x10 volumes.

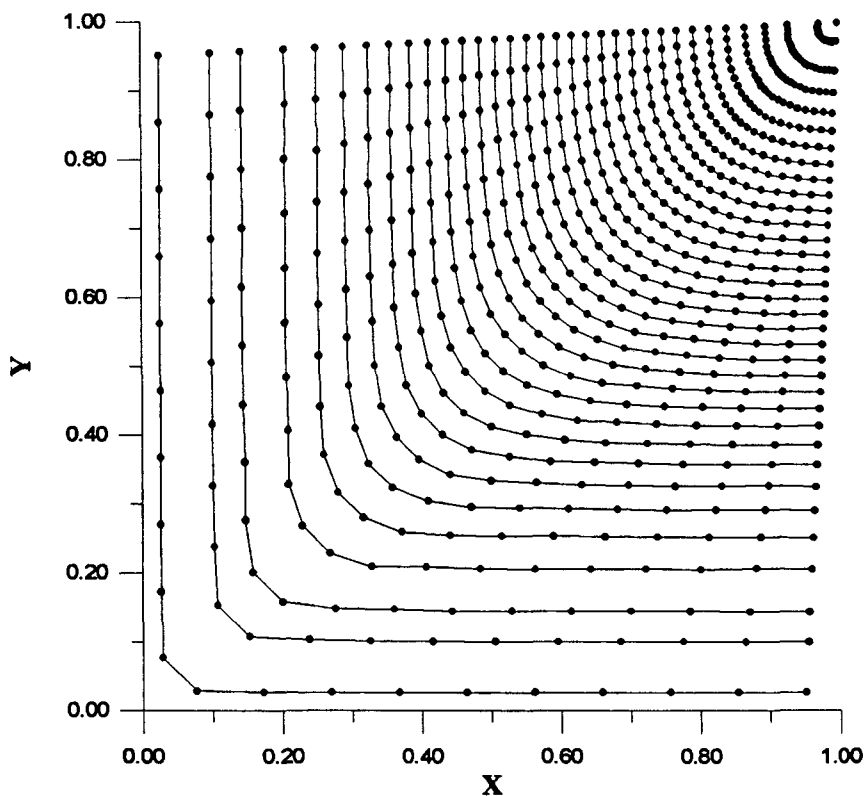


Fig. 7.7 - Posição da interface no tempo

Nas figuras 7.8 e 7.9 uma das curvas refere-se à posição da interface no eixo x ( fronteira norte do domínio ), e a outra apresenta a coordenada x da posição da interface na diagonal.

Na figura 7.8 faz-se uma comparação das soluções obtidas com as três malhas apresentadas na figura 7.6. Verifica-se que as soluções são quase coincidentes, se diferenciando um pouco apenas no final da solidificação do domínio. Isto faz com que o tempo para a solidificação de todo o domínio seja ligeiramente diferente para estes casos.

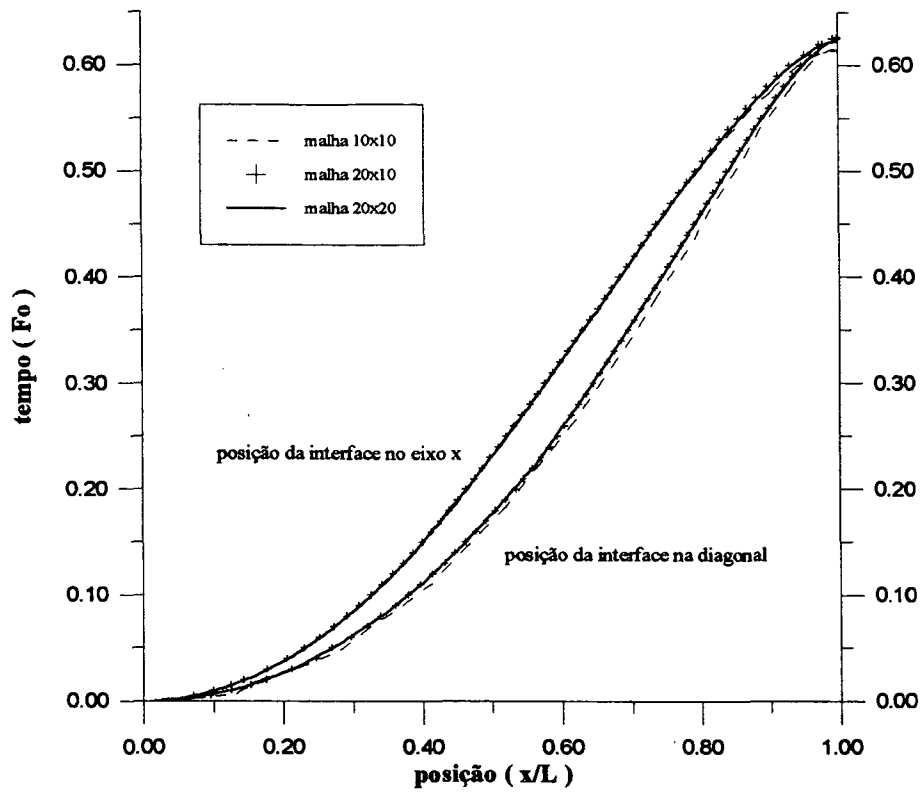


Fig. 7.8 - Soluções com o novo método

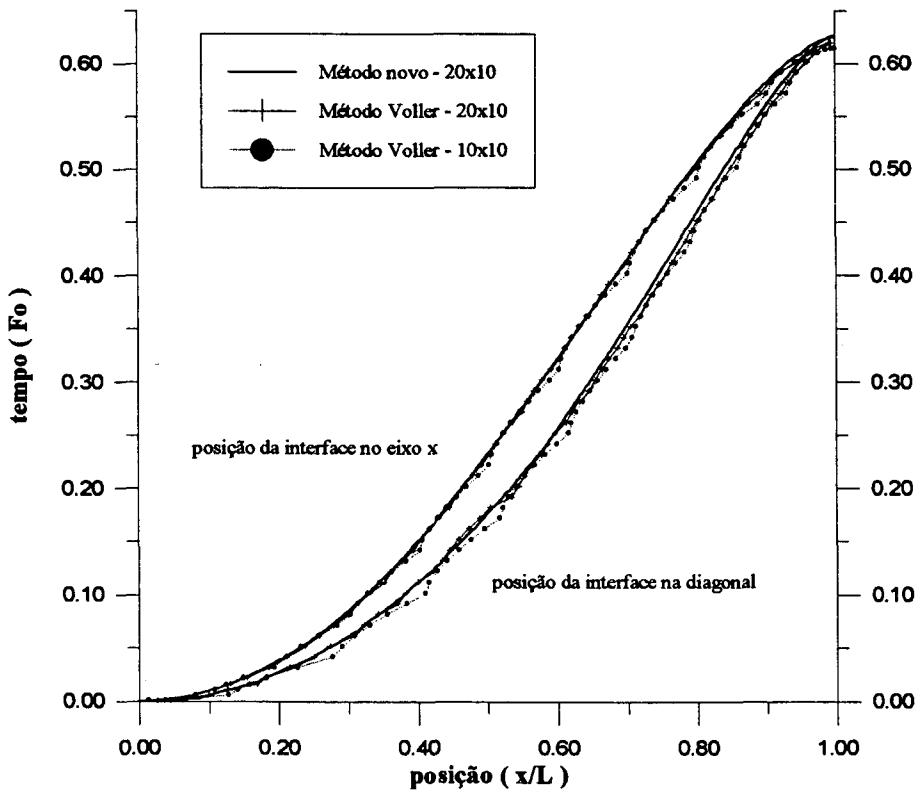


Fig. 7.9 - Comparação com método de Voller

Uma comparação entre o novo método e o método de Voller é apresentada na figura 7.9, usando a malha 10x10 volumes. Novamente verifica-se uma maior distância das soluções no final da solidificação. É importante observar que utilizou-se os mesmos avanços de tempo para todos os métodos, valendo  $\Delta t=0,001$  nos vinte primeiros passos e passando para  $\Delta t=0,002$  até o fim da solução.

Dois trabalhos apresentam valores para o tempo total de solidificação. Em termos do tempo adimensional ( $Fo=\alpha t/L^2$ ) Crowley [81] obteve 0,625, e Kim & Kaviany [126] apresentam o valor de 0,626, utilizando uma malha de 20x20 volumes no octante. Na tabela 7.1 é feito um resumo das soluções obtidas com o método novo e com o método de Voller [89], comparando tempo total para a solidificação do domínio e tempo de CPU para a solução em um microcomputador tipo 486 / 66MHz.

**Tabela 7.1 - Comparação das soluções**

malha	Método novo		Método Voller	
	tempo total	CPU(s)	tempo total	CPU(s)
10x10	0,616	22	0,615	19
20x10	0,626	48	0,620	38
20x20	0,624	93	0,620	76

O segundo problema resolvido consiste numa solidificação de um líquido inicialmente a uma temperatura superior à de mudança de fase, configurando, portanto, num problema de Neumann. Este foi proposto por Voller & Cross [79], com os seguintes valores:

- temperatura inicial:  $T_{in}=2^{\circ}\text{C}$
- temperatura da parede:  $T_w=-10^{\circ}\text{C}$
- comprimento da aresta:  $2L=1\text{m}$
- condutividade térmica:  $k_s=k_L=2\text{ W/m }^{\circ}\text{C}$
- capacidade térmica:  $(\rho c_p)_s = (\rho c_p)_L = 2,5\text{ MJ/m}^3\text{ }^{\circ}\text{C}$
- calor latente:  $\lambda=100\text{ MJ/kg }^{\circ}\text{C}$
- número de Stefan do problema:  $Ste=0,3$

A figura 7.10 apresenta uma comparação com soluções obtidas por Voller & Cross [79] e por Vielmo [127]. O resultado mostrado na figura 7.10 para o presente método foi obtido com malha 10x10 volumes no octante e avanço de tempo de 10 min. A solução obtida por Vielmo [127] utilizou método da entalpia com

malha 28x28 volumes no quadrante e avanços de tempo de 1 min. Verifica-se excelente concordância entre as soluções.

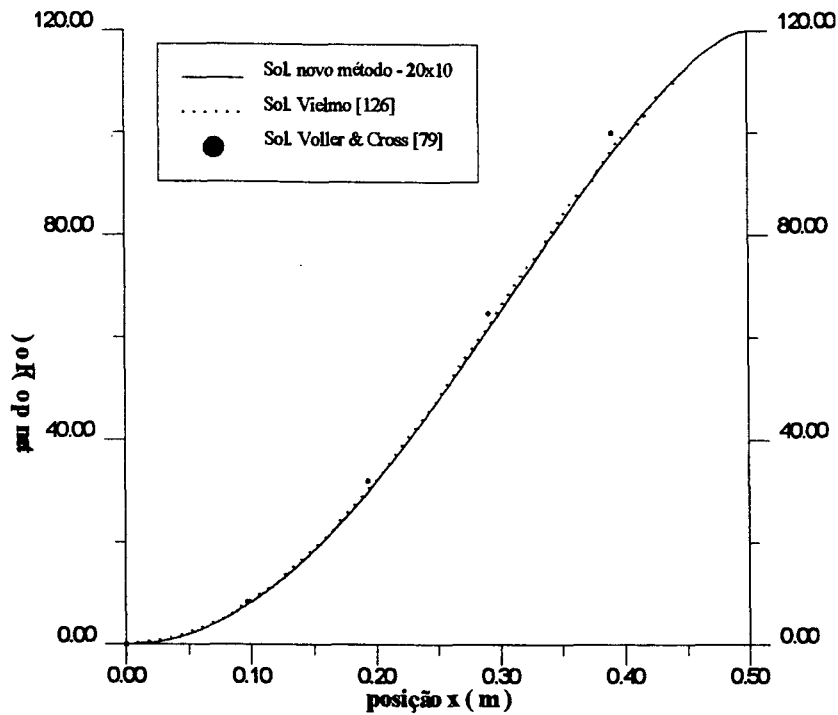


Fig. 7.10 - Comparação com soluções da literatura

Na figura 7.11 faz-se uma comparação das soluções obtidas com as três malhas estudadas. Verifica-se uma pequena variação das soluções ao final da solidificação do domínio. A tabela 7.2 apresenta os valores dos tempos finais de solidificação para os três casos.

Tabela 7.2 - Tempo total de solidificação

MALHA	TEMPO TOTAL(h)
10x10	117,8
20x10	120,0
20x20	119,5

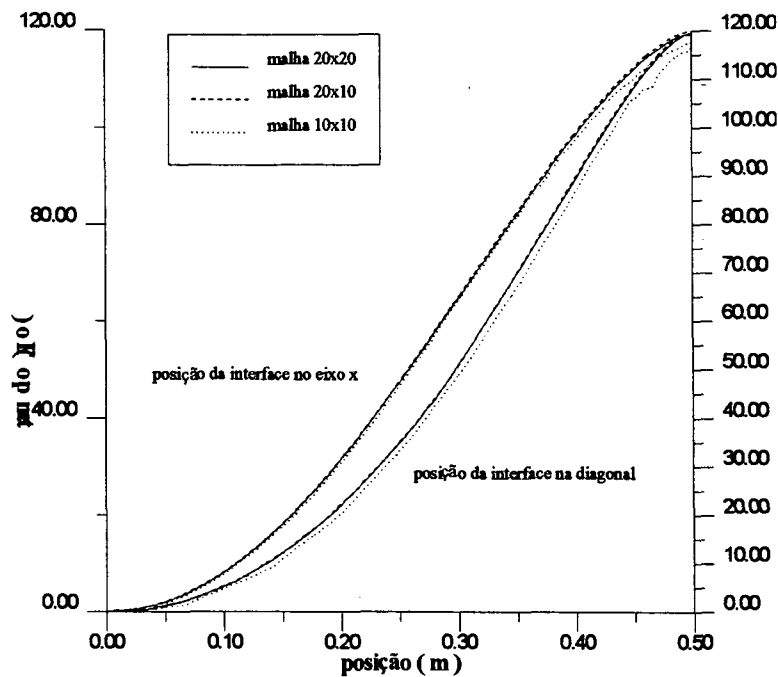


Fig. 7.11 - Soluções com as três malhas

## 7.4- SOLUÇÃO 2-D COM MALHA MÓVEL

O problema apresentado na seção anterior permite testar a utilização de malha móvel, pois a frente de mudança de fase se deforma devido à geometria do problema. Os dois tipos de malha móvel, apresentados no capítulo 5, serão testados. Nos dois casos utilizar-se-á o primeiro problema descrito na seção anterior, ou seja, o problema de Stefan com  $Ste=0,6406$ .

### 7.4.1 - Solução com Malha Ajustável

Como descrito na seção 5.3.2, a malha ajustável permite um certo desalinhamento com a interface, que é determinado pelo fator de desalinhamento,  $FD$ . Parte-se de uma malha com linhas  $\xi = cte$  coincidentes com retas na vertical e linhas  $\eta = cte$  sendo retas radiais. À medida que a frente de mudança de fase se deforma, as linhas  $\xi$  da malha devem ir se ajustando a fim de manter o paralelismo com ela. Sempre que o  $FD$  ultrapassar o valor admissível a malha é ajustada a fim de diminuir o desalinhamento



com a interface. O número de vezes que a malha é ajustada durante toda a solução do problema é função do valor do FD. Três valores serão analisados neste trabalho:  $FD = 0,05$ ;  $0,15$ ;  $0,3$ . A tabela 7.3 apresenta o número de malhas usadas durante a solução e o tempo total para solidificação completa do domínio, para cada valor do FD. Todas as soluções foram obtidas com malhas  $10 \times 10$  volumes.

Tabela 7.3 - Comparação entre soluções com diferentes valores de FD

FD	N. MALHAS	TEMPO TOTAL
0,05	9	0,615
0,15	7	0,613
0,30	5	0,613

Na figura 7.12 mostra-se uma seqüência de malhas utilizadas na solução com  $FD=0,05$ . São apresentadas superpostas a malha 1, com linhas  $\xi$  verticais; uma malha intermediária, correspondente à malha 4, isto é, após três ajustes; e a última malha, ou malha 9. Verifica-se que ocorre o ajuste esperado, resultando em linhas  $\xi$  circulares no final da solidificação.

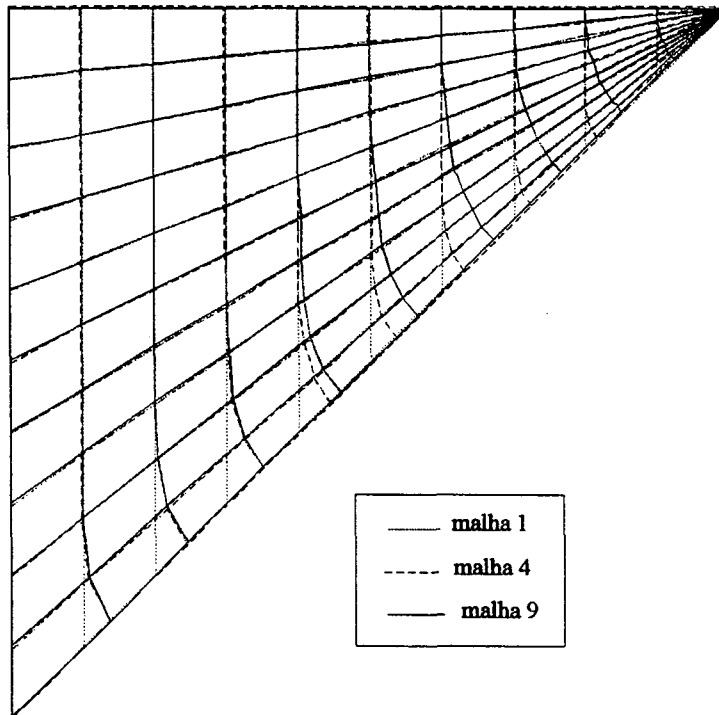


Fig. 7.12 - Ajuste da malha inicial

Na figura 7.13 mostra-se a posição da interface no decorrer da solução. Verifica-se novamente que ocorreu o ajuste esperado da malha.

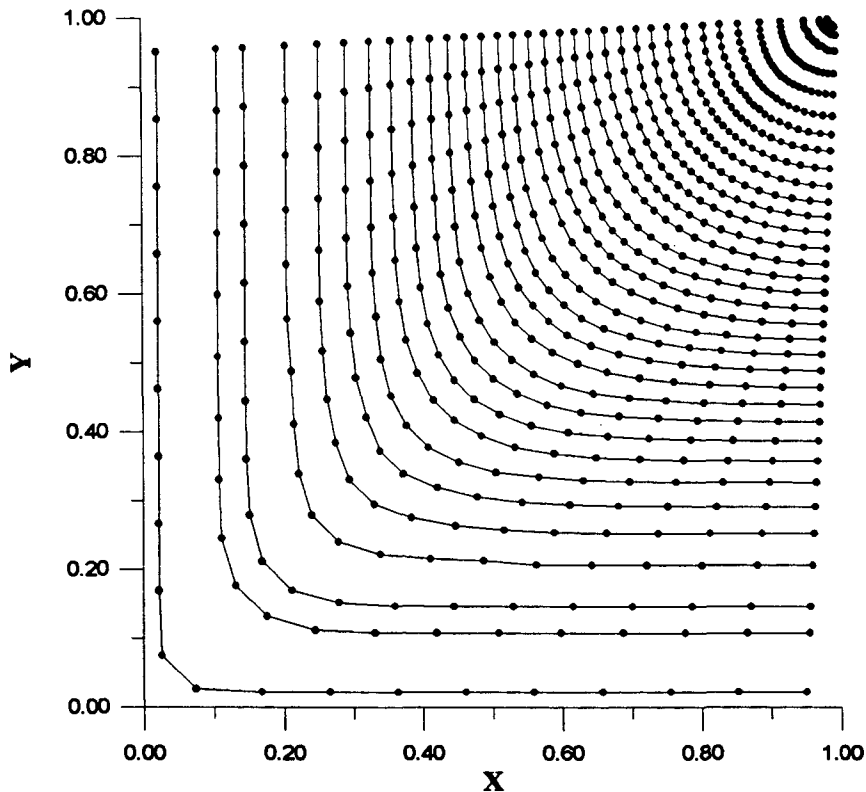


Fig. 7.13 - Posição da interface durante a solução com  $FD=0,05$

Na figura 7.14 apresentam-se as soluções com os três valores do  $FD$ .

À medida que se aumenta o  $FD$  a solução se deteriora, pois o método considera que a interface é paralela a linhas  $\xi$ . Com o aumento do  $FD$  isto é cada vez menos verdade, então a solução resulta menos precisa. Na hora de se ajustar a malha, isto é feito com relação a uma solução ruim, provocando um aumento do erro.

Este fato pode ser verificado através da solução com  $FD=0,3$ . Percebe-se que em certos momentos a solução junto à diagonal fica bastante alterada. Na figura 7.14 esta alteração é evidenciada na curva da posição da interface na diagonal. Este efeito pode ser observado na figura 7.15 que mostra a posição da interface no decorrer da solução. Observa-se exatamente o momento em que a interface se deforma junto à diagonal.

Na figura 7.16 apresentam-se as 5 malhas da solução com  $FD=0,3$ . Verifica-se que a qualidade da solução cai bastante a partir da malha 4.

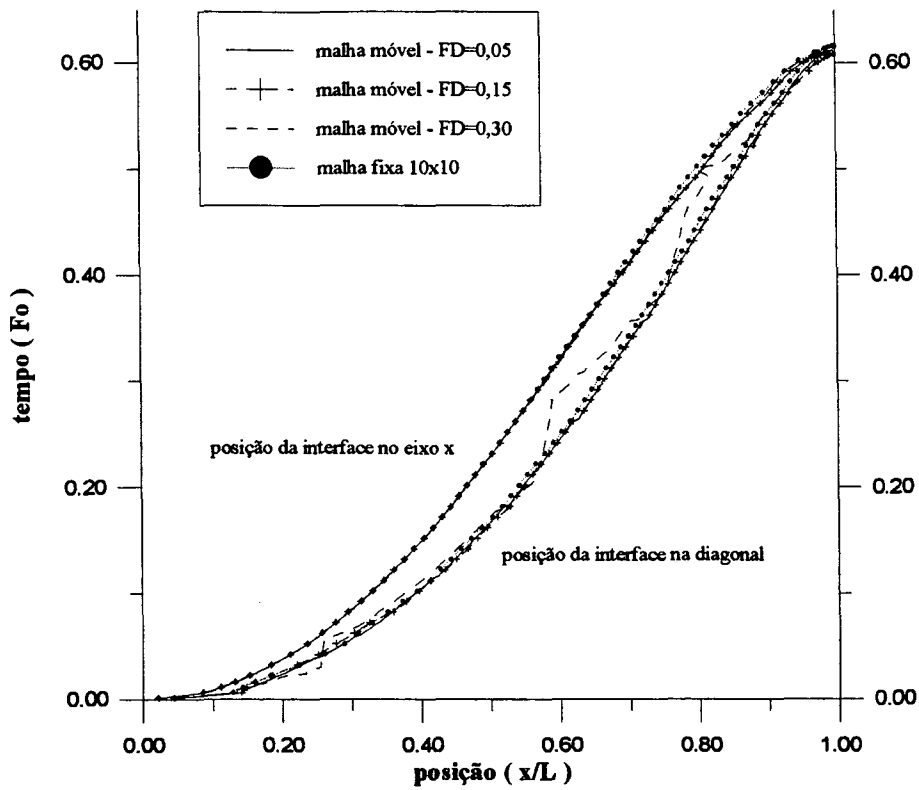


Fig. 7.14 - Comparação das soluções com malha móvel

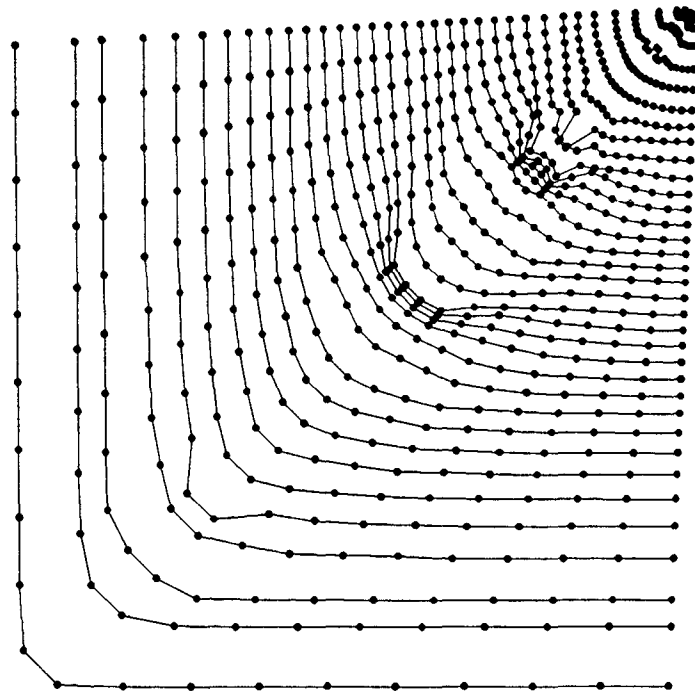


Fig. 7.15 - Posição da interface na solução com  $FD=0,3$

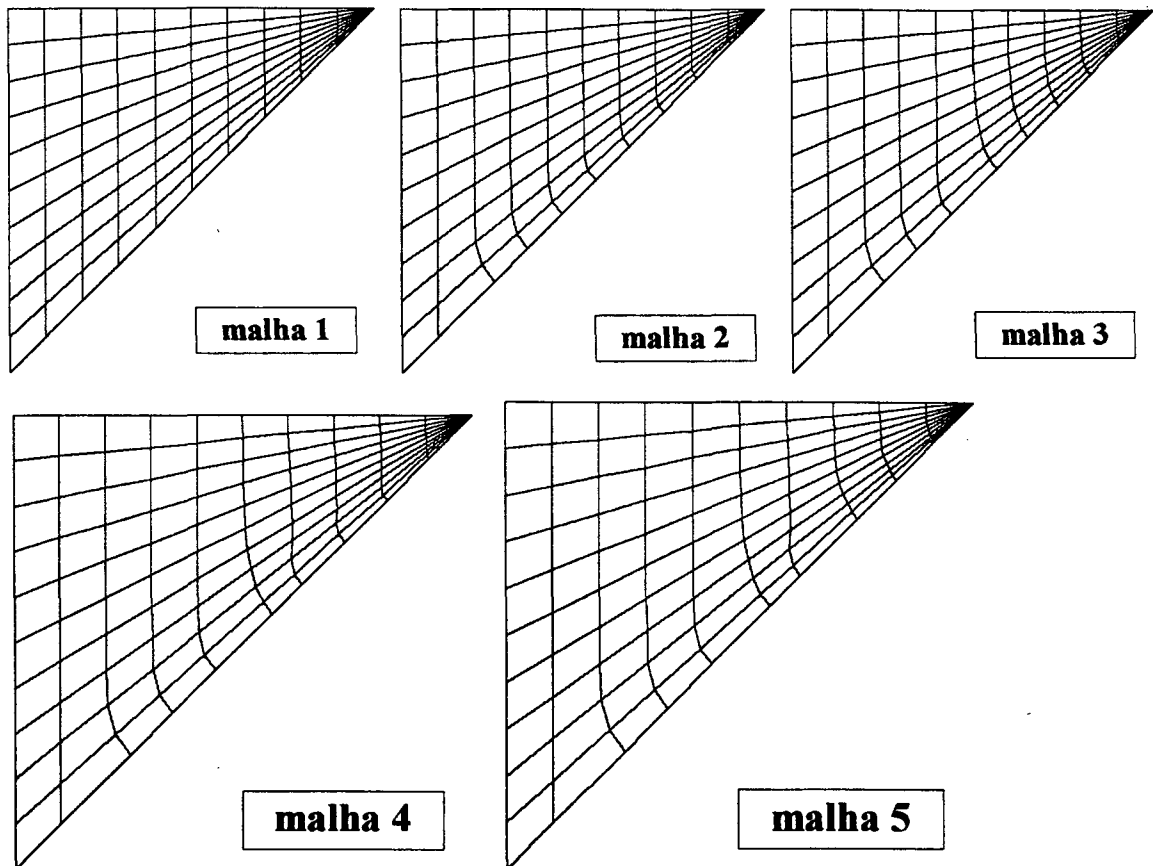


Fig. 7.16 - Malhas para a solução com  $FD=0,3$

É interessante observar que nas soluções com malha fixa ocorreram desalinhamentos desta ordem e, no entanto, a solução não perdeu a sua qualidade. Este fato é compreendido ao se verificar que os maiores desalinhamentos ocorrem quando a interface está mudando de volume. Conclui-se que exatamente nestes momentos, em que a solução numérica é mais difícil, alinha-se a malha à solução, provavelmente acarretando uma propagação de erro. Parece ser isto o que ocorre na solução apresentada para o  $FD=0,3$ , nas figuras 7.14-7.16.

#### 7.4.2 - Solução com Malha Coincidente com a Interface

Este tipo de malha móvel faz com que uma linha  $\xi = \text{cte}$  sempre coincida com a posição da interface no instante atual, como explicado na seção 5.3.2. Portanto, a malha se move em todos os avanços de tempo. Na figura 7.17 apresenta-se uma sequência de malhas usadas no decorrer da solução, com os tempos e as frações volumétricas de líquido correspondentes.

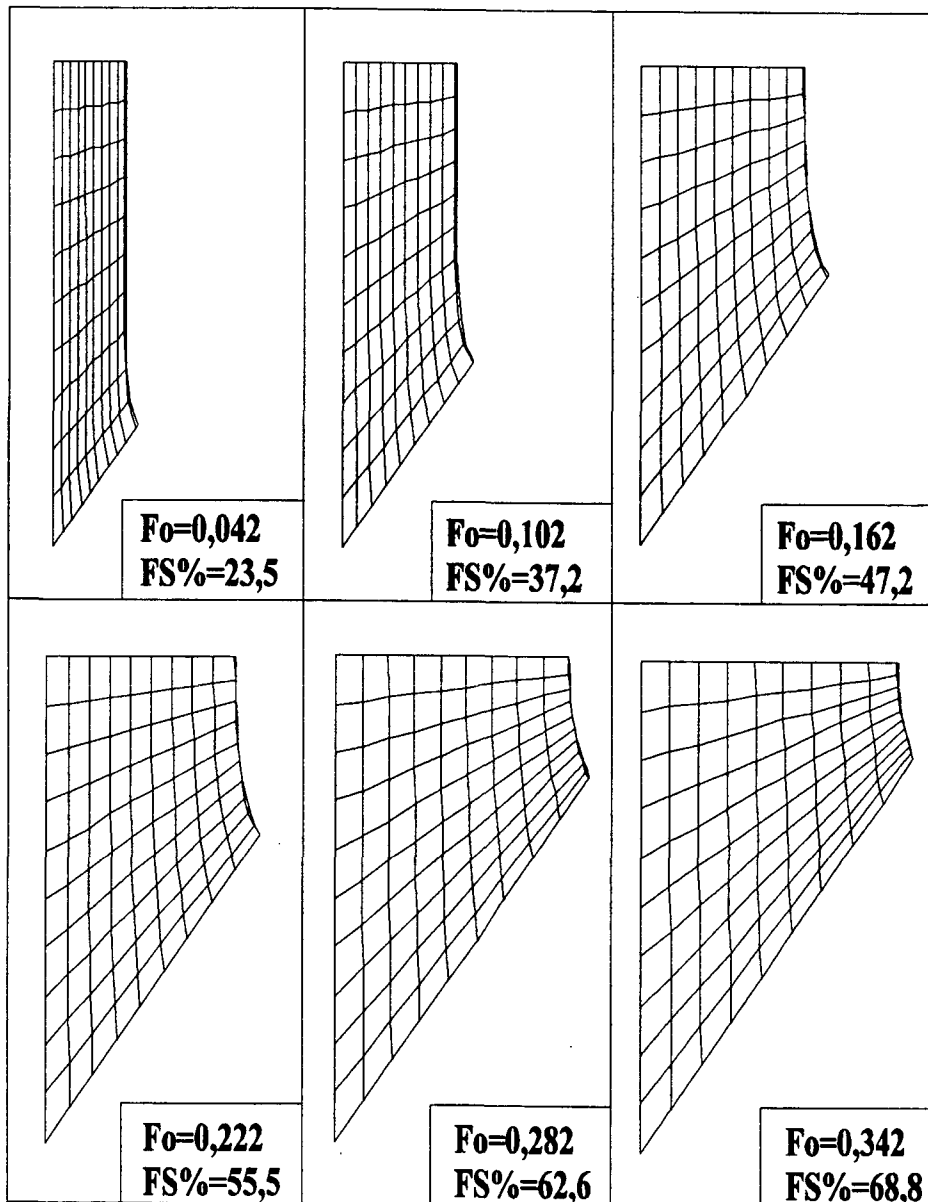


Fig. 7.17 - Malhas coincidentes com a interface para 6 instantes de tempo da solução

O problema-teste utilizado é o mesmo da seção anterior, sendo um problema de Stefan com  $Ste=0,6406$ . Como não existe fluxo de calor através da interface, pois, após esta o material se encontra à mesma temperatura de  $mdf$ , verifica-se que apenas parte do domínio precisa ser estudado. No caso do problema escolhido, trata-se de uma solidificação, então, apenas o domínio sólido necessita ser modelado. Por isto as malhas apresentadas na figura 7.17 cobrem apenas esta parte do domínio, com o número fixo de volumes  $10 \times 10$ , que se expandem à medida que o domínio aumenta. A última linha  $\xi = cte$  coincide com a posição da interface para um certo instante de tempo, e a linha  $\xi$  anterior corresponde à posição da interface no instante de tempo anterior. Uma análise das malhas permite verificar a previsão correta da forma da interface, sendo semelhante a gráficos como as figuras 7.13 e 7.7 que mostram a posição da interface no decorrer da solução.

A figura 7.18 mostra as curvas de posição  $x$  da interface na fronteira norte e na diagonal, comparadas à solução com malha fixa  $20 \times 20$  volumes no domínio. Verifica-se uma excelente concordância entre as soluções.

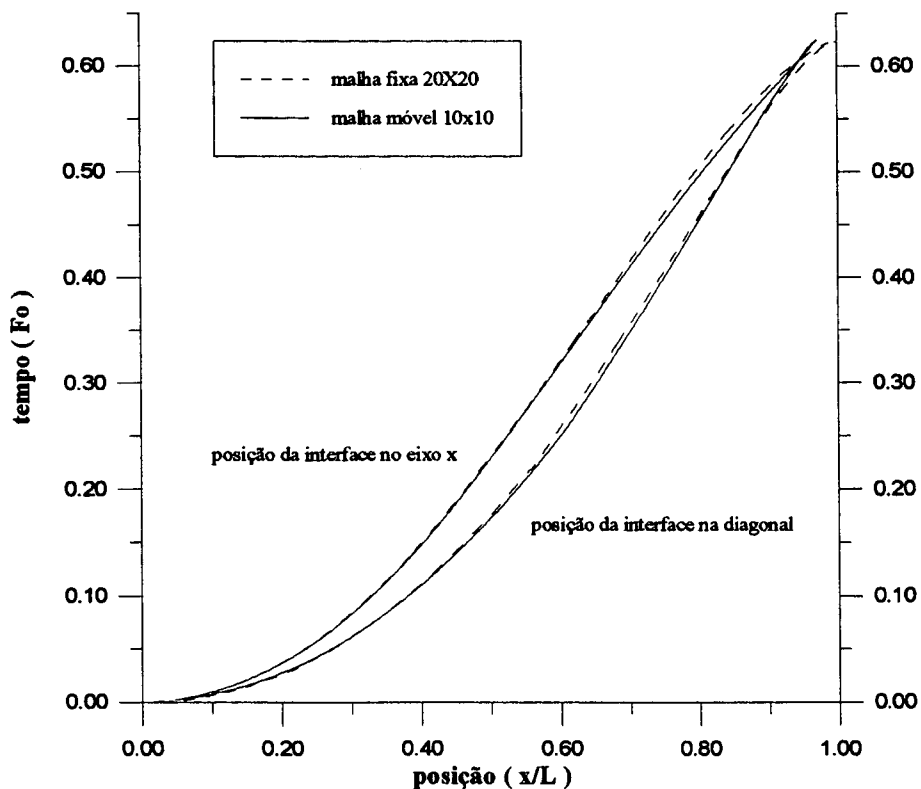


Fig. 7.18 - Comparação entre soluções com malha móvel e malha fixa

Este método é de rápida convergência, pois a equação de energia é resolvida apenas uma vez para cada avanço de tempo. As iterações são necessárias apenas para ajustar a posição da última linha da malha (coincidente com a posição da interface), utilizando o balanço de energia nos volumes em *mdf* para obter o valor do jacobiano destes volumes. A atualização da malha é um cálculo algébrico simples e rápido, assim como a atualização das métricas.

Nesta solução, o método apresentou problema no final do domínio, onde a interface tende a se reduzir a um ponto. Por isto, o cálculo do tempo total de solidificação com este método fica prejudicado neste caso. Mas esta é apenas uma peculiaridade da geometria deste problema específico, não configurando um problema do método propriamente dito.

## 7.5- SOLUÇÃO 2-D COM CONVECÇÃO NO DOMÍNIO LÍQUIDO

Para demonstrar a versatilidade do método proposto neste trabalho este será utilizado num problema envolvendo também convecção na fase líquida. O problema escolhido para este fim consiste numa fusão de estanho para a qual existem resultados experimentais levantados por Gau & Viskanta [128] e Wolff & Viskanta [129]. Este problema é bastante utilizado na literatura para comparação de resultados, podendo-se citar Gobin & Bénard [48] e Vielmo [127]. Os valores adotados para o problema são os seguintes:

- temperatura inicial:  $T_{in}=T_f= 231,9^{\circ}\text{C}$
- temperatura da parede:  $T_w= 233,9^{\circ}\text{C}$
- massa específica:  $\rho_s=\rho_L = 6980 \text{ kg/m}^3$
- calor específico:  $c_s = c_L = 257 \text{ J/kg }^{\circ}\text{C}$
- condutividade térmica:  $k_s= k_L= 32,2 \text{ W/m }^{\circ}\text{C}$
- viscosidade:  $\mu= 2,81 \times 10^{-7} \text{ m}^2/\text{s}$
- coeficiente de expansão volumétrica:  $\beta= 106 \times 10^{-6} / ^{\circ}\text{C}$
- calor latente de fusão:  $\lambda= 60600 \text{ J/kg}$

resultando nos seguintes valores de números adimensionais:

- $Pr = 0,0157$
- $Ste = 0,00848$
- $Ra_{Ly} = 1,23 \times 10^5$

A figura 7.19 apresenta uma descrição esquemática do problema. Inicialmente o estanho se encontra no estado sólido na temperatura de mudança de fase. No tempo  $t=0$ , instantaneamente a temperatura da parede esquerda da cavidade é colocada à temperatura  $T_w = \text{cte}$ , enquanto que a parede direita é mantida à temperatura inicial, ou seja, à temperatura de *mdf*. As paredes superior e inferior são isoladas, consideradas, então, adiabáticas.

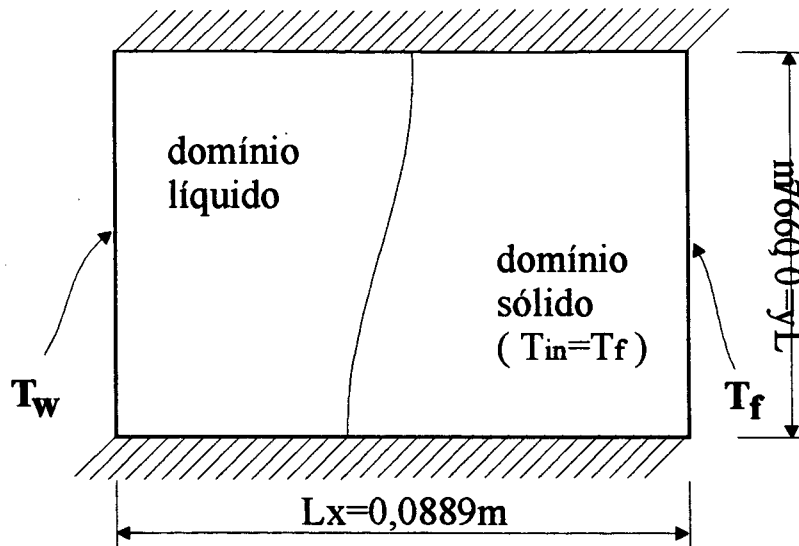


Fig. 7.19 - Esquema do problema

A presente solução é comparada com as soluções obtidas por Gobin & Bénard [48] e Vielmo [127] e com os resultados experimentais. É importante observar que os resultados experimentais não reproduzem exatamente o problema simulado, devido a limitações experimentais, conforme observado pelos autores citados. As principais dificuldades são:

- manter o material a uma temperatura homogênea igual à de mudança de fase, e
- impor a temperatura na parede ( $T_w$ ) de maneira instantânea no tempo  $t=0$ . No experimento a temperatura na parede somente atingiu o valor previsto após 7 minutos do início do processo.

Isto quer dizer que nos resultados experimentais a interface ficará em uma posição atrasada com relação à simulação numérica.



Como se sabe, no início do processo de mudança de fase ocorrem os maiores fluxos de calor, e a velocidade da interface é maior. O processo é praticamente difusivo, pois a convecção ainda não se instalou devido à razão de aspecto da cavidade existente. À medida que esta cavidade vai crescendo, a convecção vai se tornando mais e mais importante.

Na figura 7.20 apresentam-se as três simulações numéricas, as soluções da literatura e os resultados experimentais para dois tempos da solução:  $t=1,012$  h e  $t=2,079$  h.

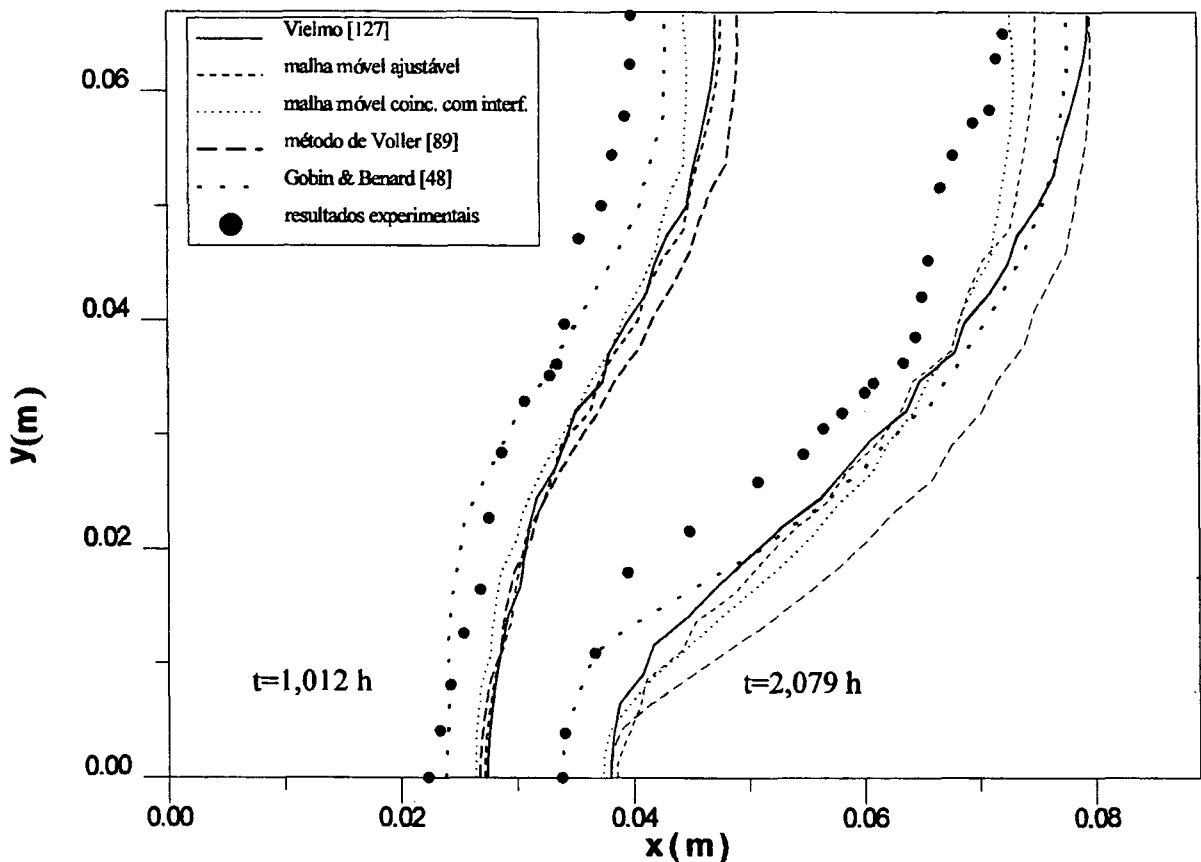


Fig. 7.20 - Solução de *md f* com convecção

Na solução de Gobin & Bénard [48], eles utilizam como condição inicial a solução experimental no tempo  $t=0,579$ h. As demais simulações são processadas a partir do tempo inicial

Verifica-se que as soluções obtidas com o novo método, nos dois tipos de malha móvel, apresentam boa concordância com a solução de Vielmo [127].

É importante ressaltar que os métodos de solução para o problema térmico são de rápida convergência. De uma forma geral, o número de iterações é determinado pela solução hidrodinâmica, pois, a solução numérica de convecção natural é bastante trabalhosa. Por isso, a limitação para o avanço de tempo também é imposta pela solução hidrodinâmica. Os avanços de tempo variaram de 1 a 10 segundos, sendo automaticamente controlados pelo programa, de acordo com a facilidade ou dificuldade da convergência.

O critério de convergência utilizado foi a convergência dos campos de velocidade  $v$  e temperatura com a tolerância de  $1 \times 10^{-5}$ , tal que

$$\left| \frac{v - v_{\text{old}}}{v_{\text{media}}} \right| < 10^{-5} \quad \text{e} \quad \left| \frac{T - T_{\text{old}}}{T_{\text{media}}} \right| < 10^{-5}$$

onde os valores médios foram calculados em cada caso e o subscrito "old" se refere a valores da iteração anterior.

Na solução apresentada utilizou-se para o fator de desalinhamento da malha ajustável o valor  $FD=0,05$ . Todas as soluções foram obtidas com malhas  $28 \times 28$  refinadas a partir da parede da esquerda que cede calor, como utilizado por Vielmo [127]. Na solução de Gobin & Bénard [48] foi utilizada uma malha irregular com  $23 \times 23$  volumes.

Na figura 7.21 são apresentados os dois tipos de malha móvel nos mesmos tempos,  $t=1,012h$  e  $t=2,079h$  usados na figura 7.20. A malha móvel ajustável, com  $FD=0,05$ , sofreu 14 ajustes até atingir a situação representada na figura 7.21a), e 25 para chegar à situação mostrada na figura 7.21b). A posição da interface nos dois tempos é mostrada pela linha tracejada. Na figura 7.21 b) verifica-se que o desalinhamento ( $FD=0,05$ ), mesmo pequeno, permite que a interface não se encontre toda em uma mesma coluna de volumes da malha.

As figuras 7.21 c) e d) se referem à malha móvel coincidente com a interface. Verifica-se que neste caso usa-se malha mais densa no domínio líquido, uma vez que esta trabalha com o número constante de colunas, apenas se expandindo à medida que o domínio cresce. Caso este não fosse um problema de Stefan, isto é, caso houvesse fluxo de calor no domínio sólido, seria necessário cobrir este domínio com uma malha que iria se comprimindo à medida que ele fosse diminuindo.

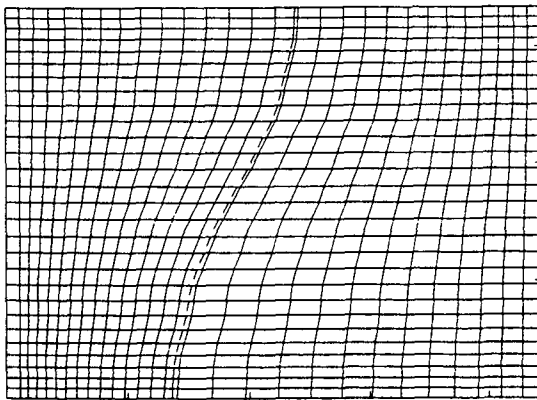
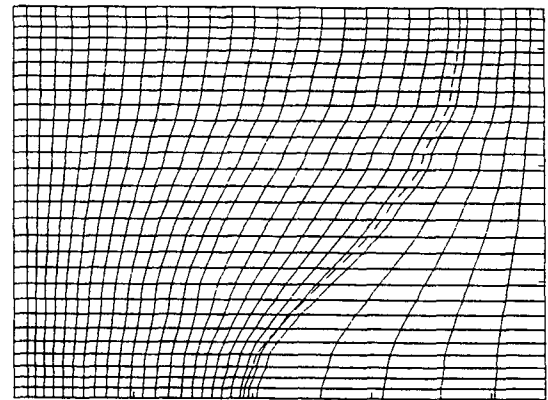
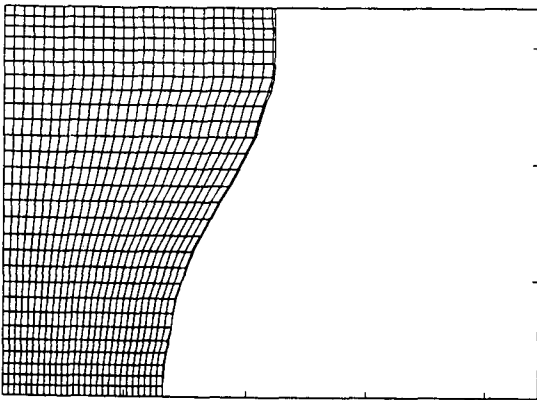
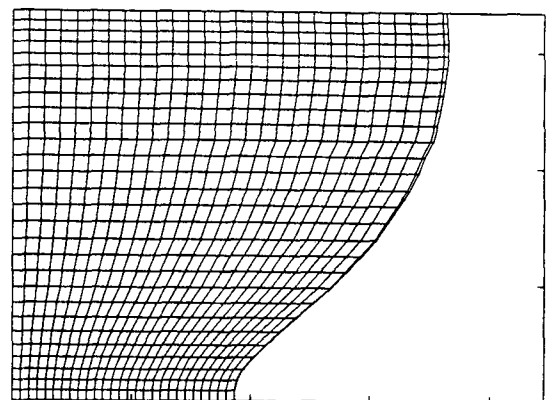
a) malha móvel ajustável,  $t=1,012h$ b) malha móvel ajustável,  $t=2,079h$ c) malha coincidente com interface,  $t=1,012h$ d) malha coincidente com interface,  $t=2,079h$ 

Fig. 7.21 - Malhas móveis da solução

A representação de linhas de corrente nos dois casos, nos mesmos tempos  $t=1,012h$  e  $t=2,079h$ , é apresentada na figura 7.22. A linha tracejada representa a posição da interface em cada situação. Verifica-se que nos dois métodos de solução o comportamento das isolinhas é semelhante, dentro do esperado para uma convecção natural com número de Rayleigh da ordem de  $10^5$ .

As isothermas nas situações correspondentes se encontram na figura 7.23. Verifica-se a deformação das isothermas devido à presença da convecção natural na cavidade líquida, e que esta deformação cresce à medida que a cavidade aumenta.

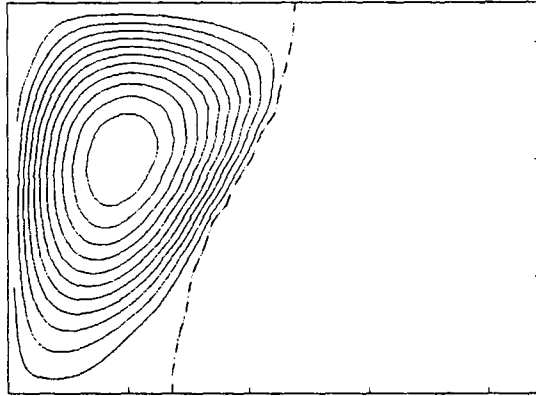
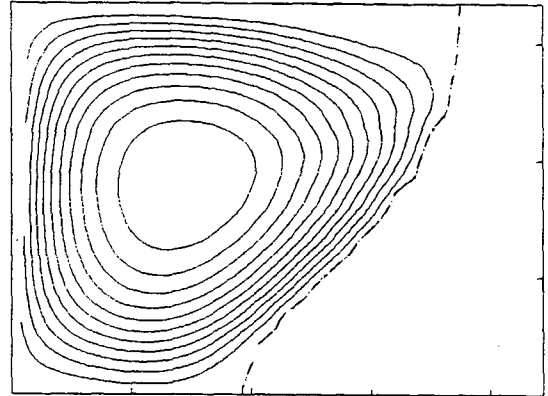
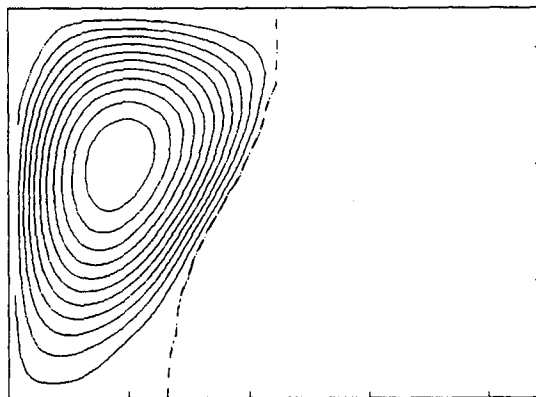
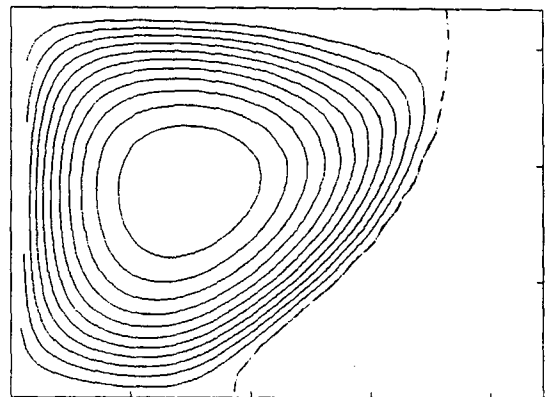
a) malha móvel ajustável,  $t=1,012h$ b) malha móvel ajustável,  $t=2,079h$ c) malha coincidente com interface,  $t=1,012h$ d) malha coincidente com interface,  $t=2,079h$ 

Fig. 7.22 - Representações das Linhas de Corrente

Os perfis de velocidade na linha média da cavidade são apresentados na figura 7.24. São representados os valores adimensionais da velocidade vertical, dados por  $v^* = vL_x / \alpha$ , versus a coordenada adimensional  $x^* = x/L_x$ . Verifica-se que para captar melhor o perfil de velocidade seriam necessários mais pontos da malha junto às paredes da cavidade, pois nesta região ocorrem os maiores gradientes.

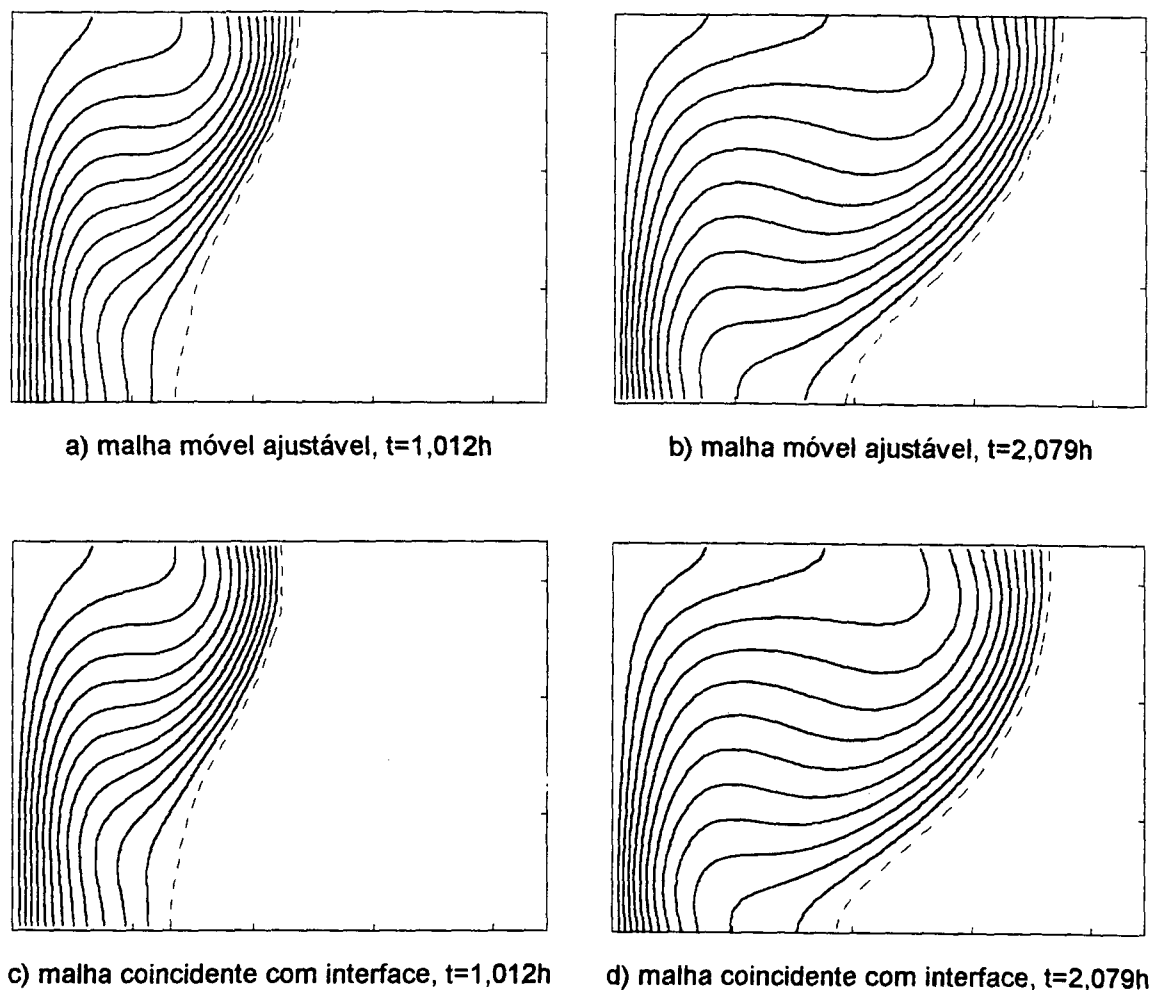


Fig. 7.23 - Representações das Isotermas

A figura 7.25 apresenta perfis de temperatura relativa na linha média da cavidade líquida. Trata-se do valor da temperatura usando a temperatura de mudança de fase como referência, da mesma maneira utilizada ao longo do desenvolvimento teórico deste trabalho.

As comparações mostradas nas figuras 7.22 a 7.25 levam à conclusão de que os métodos apresentam soluções semelhantes, havendo apenas uma pequena discrepância na previsão da posição da interface ao longo do tempo. As soluções termo e fluidodinâmicas são coerentes e os tempos computacionais requeridos pelos dois métodos são de mesma ordem de grandeza.

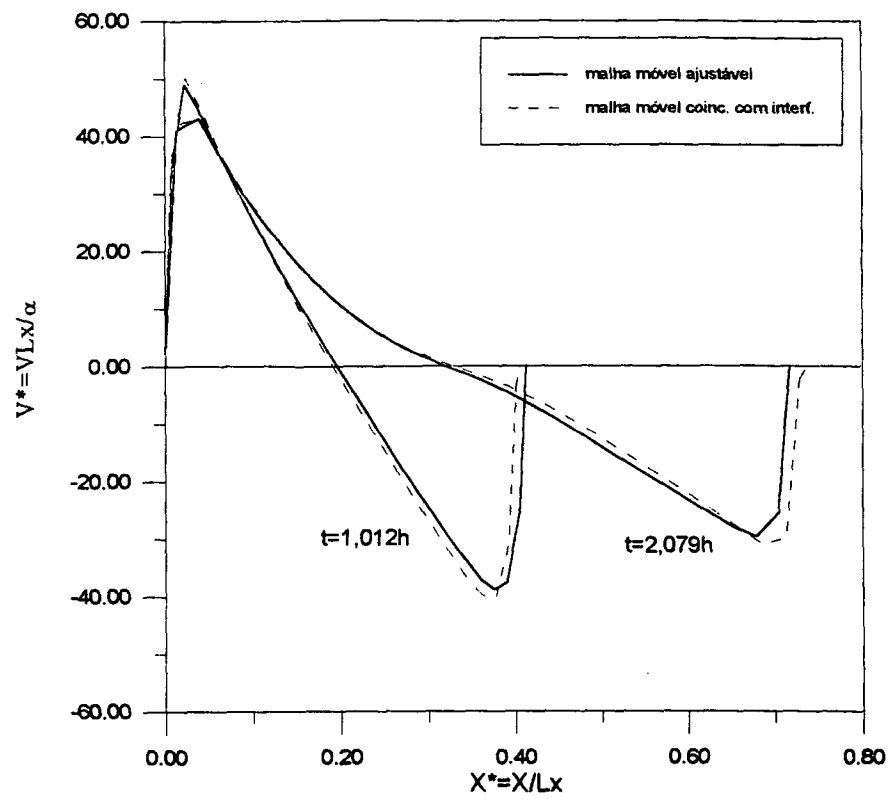


Fig. 7.24 - Perfis de velocidade na linha média da cavidade

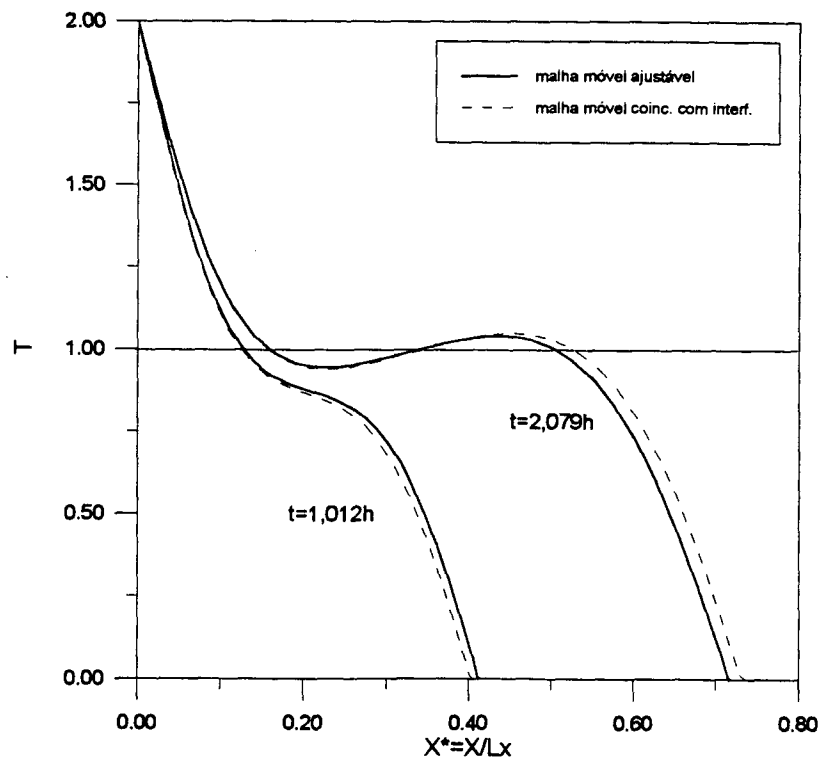


Fig. 7.25 - Perfis de temperatura na linha média da cavidade

## CAPÍTULO 8

### CONCLUSÕES

O objetivo principal do presente trabalho foi criar um novo método para solução numérica de problemas envolvendo mudança de fase. Os detalhes conclusivos foram minuciosamente relatados no corpo do trabalho. Neste capítulo apenas as conclusões principais são reafirmadas.

O novo método proposto não se classifica nas duas linhas de métodos até hoje apresentados na literatura. Na verdade, sua concepção possui características da formulação em um domínio, ou método da entalpia, mas também se assemelha à formulação em dois domínios, ou método da temperatura por ser capaz de acompanhar a posição da interface durante a solução. Por isto, o novo método foi denominado “método em um domínio com acompanhamento da frente” (“*front-tracking one-domain method*”).

Mostrou-se que este novo tratamento da interface leva a bons resultados numéricos no cálculo da temperatura, ao contrário do método da entalpia, que apresenta dificuldade em fazê-lo. É capaz de prever a posição da interface com boa precisão para pequenos e grandes valores de números de Stefan. A nova metodologia permite a utilização de diferentes valores de propriedades termodinâmicas nas diferentes fases com facilidade. É um método estável, capaz de corrigir erros introduzidos no início da solução, quando as não linearidades são importantes.

Dois tipos de malha móvel foram propostos, resultando em dois métodos bastante diferentes, porém com a mesma concepção. Novos algoritmos para adaptação das malhas à posição da interface foram desenvolvidos. Um deles requer a geração e adaptação da malha em cada avanço de tempo, por possuir uma linha coincidente com a posição da interface, e o outro permite um certo desalinhamento da malha com relação à interface, sendo ajustada de acordo com um fator de desalinhamento admissível.

Os métodos foram testados e apresentaram bons resultados. Pode-se dizer que estão completamente desenvolvidos para a solução de mudança de fase de substâncias puras, que ocorre a uma temperatura constante.

Resta ainda a sua utilização na solução de mudança de fase de materiais multicomponentes, que ocorre dentro de uma faixa de temperatura, gerando uma região intermediária onde coexistem sólido e líquido. A maior dificuldade para aplicação do novo método neste caso é a existência de três domínios, um sólido, outro líquido e um intermediário. Porém, esta não parece ser uma limitação significativa, pois, em alguns trabalhos resolve-se mudança de fase de material multicomponente utilizando o método da temperatura. Dentre eles podem-se citar Kim & Kaviany [60], Saitou & Hirata [61] e Prakash [130, 131]]. Este estudo fica como continuidade natural do presente trabalho.

Como sugestões para outros futuros trabalhos podem-se sugerir

- a utilização do novo método na mudança de fase com mudança de volume, como feito em Kim et al. [59];
- a adaptação da malha também para captar melhor as camadas limites nas fronteiras, além do alinhamento à interface já realizado.
- a aplicação da presente metodologia a problemas mais reais como solidificação de peças fundidas em moldes.



## **REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS**

- [1]- Stefan, J. - "Über die Theorie der Eisbildung Insbesondere unter die Eisbildung in Polarmeere", Ann. Phys. Chem., V42, p269-286 (1891)
- [2]- Carslaw, H. S.; Jaeger, J. C. - "Conduction of Heat in Solids", Clarendon Press, Oxford (1959)
- [3]- Ozisik, N. M. - "Heat Conduction", Wiley-Interscience, New York (1980)
- [4]- Landau, H. G. - "Heat Conduction in a Melting Solid", Q. Jl. Appl. Math., V8, p81-94 (1950)
- [5]- Muehlbaver, J. C.; Sunderland, J. E. - "Heat Conduction With Freezing and Melting", Appl. Mech. Rev., V18, p951- 959 (1965)
- [6]- Goodman, T. R. - "The Heat-Balance Integral - Further Considerations and Refinements", J. Heat Transfer, Trans. ASME 83, p83-86, (1961)
- [7]- Savino, J. M., Siegel, R. - "An Analytical Solution For Solidification of a Moving Warm Liquid Onto An Isothermal Cold Wall", Int. J. Heat Mass Transfer, V12, p803-808 (1969)
- [8]- Menning, J., Özisik, M. N. - "Coupled Integral Equation Approach For Solving Melting Or Solidification", Int. J. Heat Mass Transfer, V28, No. 8, p1481-1485 (1985)
- [9]- Bart, G. C., Hoogendoorn, C. J. - "A Model For The Extracted Heat And The Phase Front Position In Solidification With Boundary Condition Of The Third Kind", Int. J. Heat Mass Transfer, V.35, No. 2, p375-382 (1992)
- [10]- Datsev, A. B. - "On the Two-Dimensional Stefan Problem", Dokl. Akad. Nauk USSR, V101, p441-444 (1955)
- [11]- Poots, G. - "An Aproximate Treatment of a Heat Conduction Problem Involving a Two-Dimensional Solidification Front", Int. J. Heat Mass Transfer, V5, p339-348 (1962)
- [12]- Sikarskie, D. L.; Boley, B. A. - "The Solution of a Class of Two-Dimensional Melting and Solidification Problems", Int. J. Solids Struct., V1, p207-234 (1965)
- [13]- Rathjen, K. A., Jiji, L. M. - "Heat Conduction With Melting Or Freezing in a Corner", J. Heat Transfer, Trans. ASME 93, p101-109, (1971)

- [14]- Budhia, H., Kreith, F. - "Heat Transfer With Melting Or Freezing in a Wedge", Int. J. Heat Mass Transfer, V16, p195-211 (1973)
- [15]- Zhang, Z., Bejan, A. - "Solidification in The Presence of High Rayleigh Number Convection in an Enclosure Cooled From the Side", Int. J. Heat Mass Transfer, V.33, No.4, p661-671 (1990)
- [16]- Cole, G. S.; Bolling, G. F. - "The Importance of Natural Convection in Casting", Trans. TMS-AIME, V233, p1568-1572 (1965)
- [17]- Cole, G. S. - "Temperature Measurements and Fluid Flow Distributions Ahead of Solid-Liquid Interface", Trans. AIME, V239, p1287-1295 (1967)
- [18]- Heertjes, P. M. - "The Effects of a Moving Boundary on Heat Transfer by Free Convection", Chem. Engng. Sci., V25, p1881-1890 (1970)
- [19]- Vanier, C. R.; Tien, C. - "Free Convection Melting of Ice Spheres", AIChE J., V16, p76-82 (1970)
- [20]- Sparrow, E. M., Schmidt, R. R., Ramsey, J. W. - "Experiments on the Role of Natural Convection in the Melting of Solids", J. Heat Transfer, V100, p11-16 (1978)
- [21]- Gau, C., Viskanta, R. - "Effect of Natural Convection on Solidification and Melting From Below of a Pure Metal", Int. J. Heat Mass Transfer, V28, p573-587 (1985)
- [22]- Crank, J. - "Free And Moving Boundary Problems", Oxford Univ. Press, New York, (1984)
- [23]- Yao, L. S., Prusa, J. - "Melting and Freezing", Advances in Heat Transfer, V.19, (1989)
- [24]- Viskanta, R. - "Heat Transfer During Melting and Solidification of Metals", J. Heat Transfer, V110, p1205-1219 (1988)

#### MÉTODO DA TEMPERATURA

- [25]- Duda, J. L., Malone, M. F., Notter, R. H. - "Analysis of Two-Dimensional Diffusion-Controlled Moving Boundary Problems", Int. J. Heat Mass Transfer, V18, p901-910 (1975)
- [26]- Lazaridis, A. - "A Numerical Solution of the Multidimensional Solidification (or Melting) Problem", Int. J. Heat Mass Transfer, V13, p1459-1477 (1970)

- 
- [27]- Saitoh, T. - "Numerical Method for Multidimensional Freezing Problems in Arbitrary Domains, J. Heat Transfer, V100, p294-299 (1978)
- [28]- Sparrow, E. M.; Hsu, C. F. - "Analysis of Two- Dimensional Freezing on the Outside of a Coolant-Carrying Tube", Int. J. Heat Mass Transfer, V24, No.8, p1345- 1357, (1981)
- [29]- Gilmore, S. D.; Guçeri, S. I. - "Three-Dimensional Solidification, a Numerical Approach", Num. Heat Transfer, V14, p165-186 (1988)
- [30]- Sparrow, E. M., Patankar, S. V., Ramadhyani, S. - "Analysis of Melting in the Presence of Natural Convection in the Melt Region", J. Heat Transfer, V99, p520-526 (1977)
- [31]- Yao, L. S.; Chen, F. F. - "Effects of Natural Convection in the Melted Region Around a Heated Horizontal Cylinder", J. Heat Transfer, V102, p667-672 (1980)
- [32]- Saitoh, T.; Hirose, K. - "High Rayleigh Number Solutions to Problems of Latent Heat Thermal Energy Storage in a Horizontal Cylinder Capsule", J. Heat Transfer, V104, p545-553 (1982)
- [33]- Okada, M. - "Analysis of Heat Transfer During Melting from a Vertical Wall", Int. J. Heat Mass Transfer, V27, No.11, p2057-2066 (1984)
- [34]- Gadgil, A.; Gobin, D. - "Analysis of Two-Dimensional Melting in Rectangular Enclosures in Presence of Convection", J. Heat. Transfer, V106, p20-26 (1984)
- [35]- Bénard, C. Gobin, D., Martinez, F. - "Melting in Rectangular Enclosures: Experiments and Numerical Simulations", J. Heat. Transfer, V107, p794-803 (1985)
- [36]- Ho, C. J.; Viskanta, R. - "Heat Transfer During Melting from a Isothermal Vertical Wall", J. Heat Transfer, V106, p12-19, (1984)
- [37]- Ho, C. J.; Viskanta, R. - "Heat Transfer During Inward Melting in a Horizontal Tube", Int. J. Heat Mass Transfer, V27, p705-715 (1984)
- [38]- Webb, B. W.; Viskanta, R. - "Analysis of Heat Transfer During Melting of a Pure Metal from an Isothermal Vertical Wall", Num. Heat Transfer, V9, p539-558 (1986)
- [39]- Bergman, T. L.; Webb, B. W. - "Simulation of Pure Metal Melting with Buoyancy and Surface Tension Forces in the Liquid Phase", Int. J. Heat Mass Transfer, V33, No.1, p139-149 (1990)

- 
- [40]- Rieger, H., Projahn, U., Beer, H. - "Analysis of Heat Transport Mechanisms During Melting Around a Horizontal Circular Cylinder", *Int. J. Heat Mass Transfer*, V25, No.1, p137-147 (1982)
- [41]- Rieger, H., Projahn, U., Bareiss, M., Beer, H. - "Heat Transfer During Melting Inside a Horizontal Tube", *J. Heat Transfer*, V105, p226-234 (1983)
- [42]- Wu, Y. K., Prud'Homme, M., Nguyen, T. H. - "Etude Numérique de la Fusion Autour d'un Cylindre Vertical Soumis à Deux Types de Conditions Limites", *Int. J. Heat Mass Transfer*, V32, No.10, p1927-1938 (1989)
- [43]- Ho, C. J.; Chen, S. - "Numerical Simulation of Melting of Ice Around a Horizontal Cylinder", *Int. J. Heat Mass Transfer*, V29, No.9, p1359-1369 (1986)
- [44]- Ramachandran, N., Gupta, J. P., Jaluria, Y. - "Thermal and Fluid Effects During Solidification in a Rectangular Enclosure", *Int. J. Heat Mass Transfer*, V25, No.2, p187-194 (1982)
- [45]- Bénard, C., Gobin, D., Zanolli, A. - "Moving Boundary Problem: Heat Conduction in the Solid Phase of a Phase-Change Material During Melting Driven by Natural Convection in the Liquid", *Int. J. Heat Mass Transfer*, V29, No.1, p1669-1681 (1980)
- [46]- Beckermann, C.; Viskanta, R. - "Double-Diffusive Convection Due to Melting", *Int. J. Heat Mass Transfer*, V31, No.10, p2077-2089 (1988)
- [47]- Wolff, F.; Viskanta, R. - "Solidification of a Pure Metal at a Vertical Wall in the Presence of Liquid Superheat", *Int. J. Heat Mass Transfer*, V31, No.8, p1735-1744 (1988)
- [48]- Gobin, D., Bénard, C. - "Melting of Metals in Rectangular Enclosures: Numerical Results", X Congresso Brasileiro de Engenharia Mecânica, Rio de Janeiro, (1989)
- [49]- Schneider, G. E. "Computation of Solid/Liquid Phase Change Including Free Convection - Comparison With Data", *J. Thermophysics*, V. 4, No.3, (1990)
- [50]- Beyeler, E. P., Güçeri, S. I. - "A Software To Simulate Solidification In Irregularly Shaped Domains", *Num. Grid Generation in Computational Fluid Dynamics - Proceedings of the International Conf.*, at Lanshut, West Germany, 14th-17th july, (1986)
- [51]- Lacroix, M. - "Computation of Heat Transfer During Melting of a Pure Substance From a Isothermal Wall", *Num. Heat Transfer*, B, V.15, p191-210 (1989)

- [52]- Lacroix, M. - "Predictions of Natural Convection Dominated Phase-Change Problems by the Vorticity-Velocity Formulation of the Navier-Stokes Equations", Num. Heat Transfer, B, V.22, p79-93 (1992)
- [53]- Beckermann, C., Viskanta, R. - "Effect of Solid Subcooling on Natural Convection Melting of a Pure Metal", J. Heat Transfer, Trans. ASME 111, p416-424, (1989)
- [54]- Lacroix, M. - "Effects of Buoyancy and Surface Tension Forces on the Melting of a Metal", Num. Heat Transfer, A, V.19, p101-115 (1991)
- [55]- Keller, J. R., Bergman, T. L. - "Prediction of Conjugate Heat Transfer in a Solid-Liquid System: Inclusion of Buoyancy and Surface Tension Forces in the Liquid Phase", J. Heat Transfer, Trans. ASME 111, p690-698, (1989)
- [56]- Prud'Homme, M., Nguyen, T. H., Wu, Y. K. - "Simulation Numérique de la Fusion à l'Intérieur d'un Cylindre Adiabatique Chauffé par le Bas", Int. J. Heat Mass Transfer, V34, No.9, p2275-2286 (1991)
- [57]- Lacroix, M. - "Analysis of Natural Convection Melting of a subcooled Pure Metal", Num. Heat Transfer, A, V.23, p21-34 (1993)
- [58]- Kim, C.-J., Ro, S. T., Lee, J. S. - "An Efficient Computational Technique To Solve the Moving Boundary Problems in the Axisymmetric Geometries", Int. J. Heat Mass Transfer, V36, No.15, p3759-3764 (1993)
- [59]- Kim, C.-J., Ro, S. T., Lee, J. S., Kim, M. G. - "Two-Dimensional Freezing of Water Filled Between Vertical Concentric Tubes Involving Density Anomaly and Volume Expansion", Int. J. Heat Mass Transfer, V36, No.10, p2647-2656 (1993)
- [60]- Kim, C.-J., Kaviani, M. - "A Numerical Method for Phase-Change Problems With Convection and Diffusion", Int. J. Heat Mass Transfer, V35, p457-467 (1992)
- [61]- Saitou, M., Hirata, A. - "Numerical Solution of the Unsteady Solidification Problem With a Solute Element by Using the Boundary-Fitted Coordinate System", Num. Heat Transfer, B, V.22, p63-77 (1992)
- [62]- Crivelli, L. A., Idelsohn, S. R. - "A Temperature-Based Finite Element Solution for Phase-Change Problems", Int. J. Num. Meth. Enging., V.23, p99-119 (1986)

- [63]- Yoo, J.; Rubinsky, B. - "Numerical Computation Using Finite Elements for the Moving Interface in Heat Transfer Problems with Phase Change Transformation", Num. Heat Transfer, V6, p209-222 (1983)
- [64]- Yoo, J.; Rubinsky, B. - "A Finite Element Method for the Study of Solidification Processes in the Presence of Natural Convection", Int. J. Num. Meth. Engng., V23, p1785-1805 (1986)

## MÉTODO DA ENTALPIA

### MULTICOMPONENTE

- [65]- Voller, V. R.; Prakash, C. - "A Fixed Grid Numerical Modelling Methodology for Convection-Diffusion Mushy Region Phase-Change Problems", Int. J. Heat Mass Transfer, V30, No.8, p1709-1719 (1987)
- [66]- Incropera, F. P.; Bennon, W. D. - "Numerical Analysis of Binary Solid-Liquid Phase Change Using a Continuum Model", Num. Heat Transfer, V13, p277-296 (1988)
- [67]- Voller, V. R., Brent, A. D., Prakash, C. - "The Modelling of Heat, Mass and Solute Transport in Solidification Systems", Int. J. Heat Mass Transfer, V32, No.9, p1719-1731 (1989)
- [68]- Hills, R. N. - "A Thermodynamically Consistent Model of a Mushy Zone", Q. J. Mech. Appl. Math., V36, p505-539 (1983)
- [69]- Bennon, W. D.; Incropera, F. P. - "A Continuum Model Momentum Heat and Species Transport in Binary Solid-Liquid Phase Change Systems - I. Model Formulation", Int. J. Heat Mass Transfer, V30, p2161-2170 (1987)
- [70]- Bennon, W. D.; Incropera, F. P. - "A Continuum Model Momentum Heat and Species Transport in Binary Solid-Liquid Phase Change Systems - II. Applications to Solidification in a Rectangular Cavity", Int. J. Heat Mass Transfer, V30, p2171-2187 (1987)
- [71]- Bennon, W. D.; Incropera, F. P. - "Numerical Simulation of Binary Solidification in a Vertical Channel with Thermal and Solutal Mixed Convection", Int. J. Heat Mass Transfer, V31, No.10, p2147-2160 (1988)
- [72]- Christenson, M. S., Bennon, W. D., Incropera, F. P. - "Solidification of an Aqueous Ammonium Chloride Solution in a Rectangular Cavity - II - Comparison of Predicted and Measured Results", Int. J. Heat Mass Transfer, V32, No.1, p69-79 (1989)

- [73]- Beckermann, C. ; Viskanta, R. - "Double- Diffusive Convection During Dendritic Solidification of a Binary Mixture", Phys. Chem. Hydrod., V10, p195-213 (1988)
- [74]- Shyy, W., Chen, M.-H. - "Effect of Prandtl Number on Buoyancy-Induced Transport Process With and Without Solidification", Int. J. Heat Mass Transfer, V33, No.11, p2565-2578, (1990)

### SUBSTÂNCIA PURA

- [75]- Tacke, K-H. - "Discretization of the Explicit Enthalpy Method for Planar Phase Change", Int. J. Num. Meth. Engng., V21, p543-554 (1985)
- [76]- Cao, Y., Faghri, A., Chang, W. S. - "A Numerical Analysis of Stefan Problems for Generalized Multi-Dimensional Phase-Change Structures Using the Enthalpy Transforming Model", Int. J. Heat Mass Transfer, V32, No.7, p1287-1298 (1989)
- [77]- Cao, Y.; Faghri, A. - "Thermal Protection from Intense Localized Moving Heat Fluxes Using Phase-Change Materials", Int. J. Heat Mass Transfer, V33, No.1,p127-138 (1990)
- [78]- Hunter, L. W., Kuttler, J. R. - "The Enthalpy Method for Heat Conduction Problems With Moving Boundaries", J. Heat Transfer, Trans. ASME 111, p239-242, (1989)
- [79]- Voller, V.; Cross, M. - "Accurate Solutions of Moving Boundary Problems Using the Enthalpy Method", Int. J. Heat Mass Transfer, V24, p545-556 (1981)
- [80]- Voller, V.; Cross, M. - "An Explicit Numerical Method to Track a Moving Phase Change Front", Int. J. Heat Mass Transfer, V26, p147-150 (1983)
- [81]- Crowley, A. B.; Ockendon, J. R. - "On the Numerical Solution of an Alloy Solidification Problem", Int. J. Heat Mass Transfer, V22, p941-947 (1979)
- [82]- Shamsundar, N.; Sparrow, E. M. - " Analysis of Multidimensional Conduction Phase-Change Via the Enthalpy Model", J. Heat Transfer, Trans. ASME V.97, p333-340 (1975)
- [83]- Voller, V. R., Cross, M., Markatos, N. C. - "An Enthalpy Method for Convection/Diffusion Phase Change", Int. J. Num. Meth. Engng., V24, p271-294 (1987)

- 
- [84]- Brent, A. D., Voller, V. R., Reid, K. J. - "The Enthalpy-Porosity Technique for Modeling Convection-Diffusion Phase Change : Application to the Melting of a Pure Metal", Num. Heat Transfer, V13, p297-318 (1988)
- [85]- Hibbert, S. E. - "Computer Simulation of Moving- Interface, Convective, Phase-Change Processes", Int. J. Heat Mass Transfer, V31, No.9, p1785-1795 (1988)
- [86]- Schneider, G. E., Raw, M. J. - "An Implicit Solution Procedure for Finite Difference Modeling of the Stefan Problem", AIAA Journal, V.22, No.11, (1984)
- [87]- Lee, S. L., Tzong, R. Y. - "An Enthalpy Formulation for Phase Change Problems With a Large Thermal Diffusivity Jump Across the Interface", Int. J. Heat Mass Transfer, V34, p1491-1502 (1991)
- [88]- Raw, W. Y., Lee, S. L. - "Application of Weighting Function Scheme on Convection-Conduction Phase Change Problems", Int. J. Heat Mass Transfer, V34, p1503 (1991)
- [89]- Voller, V. R. - "Fast Implicit Finit-Difference Method for the Analysis of Phase Change Problems", Num. Heat Transfer, B, V.17, p155-169, (1990)
- [90]- Voller, V. R., Swaminathan, C. R. - "General Source-Based Method for Solidification Phase Change", Num. Heat Transfer, B, V.19, p175-189, (1991)
- [91]- Voller, V. R., Swaminathan, C. R. - "Treatment of Discontinuous Thermal Conduction in Control-volume Solutions of Phase-Change Problems", Num. Heat Transfer, B, V.24, p161-180, (1993)
- [92]- Lacroix, M. - "Numerical Simulation of Melting and Resolidification of a Phase Change Material Around Two Cylindrical Heat Exchangers", Num. Heat Transfer, A, V.24, p143-160, (1993)
- [93]- Tzong, R. Y., Lee, S. L. - "Solidification of Arbitrarily Shaped Casting in Mold-Casting System", Int. J. Heat Mass Transfer, V35, No.11, p2795-2803 (1992)
- [94]- Morgan, K. - "A Numerical Analysis of Freezing and Melting with Convection", Comp. Meth. Appl. Engng., V28, p275- 284 (1981)
- [95]- Gartling, D. K. - "Finite Element Analysis of Convective Heat Transfer Problems with Change of Phase", In Computer Methods in Fluids, Edited by K. Morgan et al., p257-284 Pentech, London (1980)



- [96]- Samands, M. - "Finite Element Modelling of Solidification in Sand Castings Employing an Implicit- Explicit Algorithm", Appl. Math. Modeling, V9, p170-174 (1985)

### COMPARAÇÃO ENTRE MÉTODOS

- [97]- Griffith, R., Nassersharif, B. - "Comparison of One-Dimensional Interface-Following and Enthalpy Methods for the Numerical Solution of Phase Change", Num. Heat Transfer, B, V.18, p169-187, (1990)
- [98]- Lacroix, M., Voller, V. R. - "Finite Difference Solutions of Solidification Phase Change Problems: Transformed Versus Fixed Grids", Num. Heat Transfer, B, V.17, p25-41, (1990)
- [99]- Viswanath, R., Jaluria, Y. - "A Comparison of Different Solution Methodologies for Melting and Solidification Problems in Enclosures", Num. Heat Transfer, B, V.24, p77-105, (1993)
- [100]- Poirier, D., Salcudean, M. - "On Numerical Methods Used in Mathematical Modeling of Phase Change in Liquid Metals", J. Heat Transfer, Trans. ASME 110, p562-570, (1988)

### OUTROS MÉTODOS

- [101]- Hirata, T.; Nishida, K. - "An Analysis of Heat Transfer Using Equivalent Thermal Conductivity of Liquid Phase During Melting Inside an Isothermally Heated Horizontal Cylinder", Int. J. Heat Mass Transfer, V32, p1663-1670 (1989)
- [102]- Uchikawa, S.; Takeda, R. - "Use of a Boundary-Fitted Coordinate Transformation for Unsteady Heat Conduction Problems in Multiconnected Regions with Arbitrarily Shaped Boundaries", J. Heat Transfer, V107, p494-498 (1985)
- [103]- Runnels, S. R., Carey, G. F. - "Finite Element Simulation of Phase Change Using Capacitance Methods", Num. Heat Transfer, B, V.19, p13-30, (1991)
- [104]- Sheen, S., Hayakawa, K.-I. - "Finite Difference Simulation for Heat Conduction With Phase Change in an Irregular Food Domain With Volumetric Change", Int. J. Heat Mass Transfer, V34, No.6, p1337-1346 (1991)
- [105]- Yao, M., Chait, A. - "An Alternative Formulation of the Apparent Heat Capacity Method for Phase-Change Problems", Num. Heat Transfer, B, V.24, p279-300, (1993)

- [106]- Zeng, X., Faghri, A. - "Temperature-Transforming Model for Binary Solid-Liquid Phase-Change Problems Part I: Mathematical Modeling and Numerical Methodology", Num. Heat Transfer, B, V.25, p447-480, (1994)
- [107]- Zeng, X., Faghri, A. - "Temperature-Transforming Model for Binary Solid-Liquid Phase-Change Problems Part II: Numerical Simulation", Num. Heat Transfer, B, V.25, p481-500, (1994)
- [108]- Tszeng, T. C., Im, Y. T., Kobayashi, S. - "Thermal Analysis of Solidification by the Temperature Recovery Method", Int. J. Mach. Tools Manufact., V29, No.1, p107-120 (1989)

### MÉTODOS NUMÉRICOS

- [109]- Patankar, S. V. - "Numerical Heat Transfer and Fluid Flow", Mc Graw-Hill, New York (1980)
- [110]- Maliska, C. R. - "Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional", Livros Técnicos e Científicos Editora, Rio de Janeiro, RJ, Brasil (1995)
- [111]- Gray, D. D.; Giorgini, A. - "The Validity of the Boussinesq Approximation for Liquids and Gases", Int. J. Heat Mass Transfer, V19, p545-551 (1976)
- [112]- Nansteel, M. W.; Greif, R. - "Natural Convection Heat Transfer in Undivided and Partially Divided Rectangular Enclosures", J. Heat Transfer, V103, p623-629 (1981)
- [113]- Flemings, M. C. - "Solidification Processing", Mc Graw- Hill New York (1974)
- [114]- Mehrabian, R. - "Interdendritic Fluid Flow and Macrosegregation; Influence of Gravity", Met. Trans. B1, p1209-1220 (1987)
- [115]- Thompson, J. F, Warsi, ., Mastin, C. W. - "Numerical Grid Generation- Foundations and Applications", Elsevier Science Publishing Co., Inc., USA (1985)
- [116]- Lee, S. L. - "Weighting Function Scheme and Its Application on Multidimensional Conservation Equations", Int. J. Heat Mass Transfer, V32, p2065-2073 (1989)
- [117]- Shamsundar, N., Roosz, E. - "Numerical Methods for Moving Boundary Problems", in Handbook of Numerical Heat Transfer", by Minkowycz, W. J. et al., Wiley - Interscience Publication, p747-786, (1988)

- [118]- Demirdzic, I.; Peric, M. - "Space Conservation Law in Finite Volume Calculations of Fluid Flow", Int. J. Num. Meth. Fluids., V8, p1037-1050 (1988)
- [119]- Peric, M., Kessler, R., Scheuerer, G. - "Comparison of Finite-Volume Numerical Methods with Staggered and Colocated grids", Comp. & Fluids, V16, p389-403, (1988).
- [120]- Marchi, C. H., Maliska, C. R., Bortoli, A. L. - "The use of Co-Located Variables in the Solution of Supersonic Flows", X COBEM, Rio de Janeiro, RJ, (1989).
- [121]- Marchi, C. H.; Maliska, C. R. - "A Nonorthogonal Finite-Volume Method for the Solution of All Speed Flows Using Co-Located Variables", Num. Heat Transfer, B, V.26, p293-311, (1994)
- [122]- Raithby, G. D. - "Some Recent Advances in Computational Fluid Dynamics", IX COBEM, Florianópolis, SC, (1987)
- [123]- Van Doormaal, J. P.; Raithby, G. D. - "Enhancements of the SIMPLE Method for Predicting Incompressible Fluid Flows", Num. Heat Transfer, V.7, p147-163, (1984)
- [124]- Majundar, S. - "Role of Underrelaxation in Momentum Interpolation for Calculation of Flow with Nonstaggered Grids", Num. Heat Transfer, V.13, p125-132, (1988)
- [125]- Raithby, G. D.; Torrance, K. E. - "Upstream-Weighted Differencing Schemes and their Application to Elliptic Problems Involving Fluid Flow", Computer and Fluids, V2, p12-26 (1967)

### COMPARAÇÃO DE RESULTADOS

- [126]- Kim, C.-J., Kaviany, M. - "A Numerical Method for Phase-Change Problems", Int. J. Heat Mass Transfer, V33, p2721-2734 (1990)
- [127]- Vielmo, H. A. - "Simulação Numérica da Transferência de Calor e Massa na Solidificação de Ligas Bimetálicas", Tese de Doutorado, UFSC, (1993)
- [128]- Gau, C., Viskanta, R. - "Melting and Solidification of a Pure Metal on a Vertical Wall", J. Heat Transfer, V108, p174-181 (1986)
- [129]- Wolff, F., Viskanta, R. - "Melting of a Pure Metal from a Vertical Wall", Experimental Heat Transfer, V01, p17-30 (1987)

- [130]- Prakash, C. - "Two-Phase Model for Binary Solid-Liquid Phase Change, Part I: Governing Equations", Numerical Heat Transfer, B, V18, p131-145 (1990)
- [131]- Prakash, C. - "Two-Phase Model for Binary Solid-Liquid Phase Change, Part II: Some Illustrative Examples", Numerical Heat Transfer, B, V18, p147-167 (1990)